UNIVERSIDADE
BEIRA INTERIOR

Estudo da Atomização de Jatos Eletrohidrodinâmicos

modelação, desempenho e aplicações

Sílvio Miguel Rodrigues Cândido

Tese para obtenção do Grau de Doutor em
Engenharia Mecânica
(3º ciclo de estudos)

Orientador: Prof. Doutor José Carlos Páscoa Marques

Covilhã, maio de 2024

Composição do Júri

Presidente

Doutor Paulo Jorge Pimental de Oliveira

Professor catedrático da Faculdade de Engenharia da Universidade da Beira Interior

Vogais

Doutor João Melo de Sousa

Professor associado da Instituto Superior Técnico da Universidade de Lisboa
(Arguente)

Doutor Senentxu Lanceros-Méndez

Professor associado da Universidade do Minho
(Arguente)

Doutor Miguel Rosa Oliveira Panão

Professor auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Doutor Lucas Caetano Groshe

Investigador, 4ITEC LUSITÂNIA (Grupo Stellantis)

Orientador

Doutor José Carlos Páscoa Marques

Professor catedrático da Faculdade de Engenharia da Universidade da Beira Interior

Provas públicas realizadas a 6 de maio de 2024

Declaração de Integridade

Eu, Sílvio Miguel Rodrigues Cândido, que abaixo assino, estudante com o número de inscrição D2688 do curso de 3º ciclo Engenharia Mecânica da Faculdade de Engenharia, declaro ter desenvolvido o presente trabalho e elaborado o presente texto em total consonância com o **Código de Integridades da Universidade da Beira Interior.**

Mais concretamente afirmo não ter incorrido em qualquer das variedades de Fraude Académica, e que aqui declaro conhecer, que em particular atendi à exigida referenciação de frases, extratos, imagens e outras formas de trabalho intelectual, e assumindo assim na íntegra as responsabilidades da autoria.

Univeridade da Beira Interior, Covilhã, 16 de maio de 2024



Assinado por: Sílvio Miguel Rodrigues Cândido
Identificação: BI13254442
Data: 2024-05-16 às 15:30:22

Agradecimentos

O meu especial agradecimento ao meu orientador, Professor Doutor José Carlos Páscoa Marques pelas oportunidades que me tem concedido e por todo o conhecimento e experiência que me transferiu durante os últimos anos, e ainda pela confiança depositada em mim, pelo incentivo à criatividade e autonomia.

Aos meus pais e irmão, um enorme obrigado pelo apoio incondicional, incentivo e confiança que sempre depositam em mim. A toda a minha família obrigado apoio e incentivo ao longo dos anos. Igualmente, um grande obrigado à minha madrinha e padrinho pelo suporte moral e ajuda em todas as etapas da minha vida. A todos os meus amigos que me apoiaram ao longo destes anos, um grande obrigado. Sem todos vocês seria impossível chegar aqui.

Agradeço ainda a todos os colegas do ClusterDEM pela disponibilidade, ajuda e companheirismo que foi essencial para o decorrer deste trabalho.

Apoios

Este trabalho foi suportado por Fundos Portugueses da Fundação para a Ciência e Tecnologia, FCT, através da bolsa individual para doutoramento com o número 2020.04517.BD. Os resultados iniciais também foram suportados por uma bolsa de investigação dentro do Projeto INDTECH 4.0 - Novas Tecnologias para Fabricação Inteligente, POCI-01-0247--FEDER-026653. Ainda teve o apoio da Agenda Mobilizadora para a inovação empresarial "GreenAuto: Inovação Verde para a Indústria Automóvel" número 02/C05-i01.02/2022.PC644867037-00000013, cofinanciada pelo Plano de Recuperação e Resiliência Português. Todo o trabalho for suportado pelo centro de investigação português C--MAST Center for Mechanical and Aerospace Science and Technology - UIDB/00151/2020 e UIDP/00151/2020 (Portugal) https://doi.org/10.54499/UIDP/00151/2020.



Resumo

Nesta tese apresenta-se primeiramente uma descrição preliminar da literatura existente sobre a formação de jatos por efeitos eletrohidrodinâmicos, usualmente referenciados como "cones de Taylor". Este fenómeno é de carácter multifísico e tem vindo a ser estudado a fim de podermos controlar eficazmente a forma e dimensão das gotas. Contudo é necessário conhecer melhor a interação entre o campo elétrico e a dinâmica do escoamento, sendo este o propósito geral deste trabalho.

A presente tese concentra-se na atomização de jatos eletrohidrodinâmicos (EHD) através de uma abordagem numérica tridimensional para investigar as instabilidades associadas a estes mesmos jatos. No âmbito desta investigação foi realizada uma validação meticulosa da implementação de equações que acoplam as equações de Navier-Stokes, responsáveis pela dinâmica dos fluidos, e as equações de Maxwell para a eletrostática. Estas validações foram realizadas em cenários específicos, tais como a deformação de gotas individuais suspensas em meio dielétrico e a formação de jatos 2D em modo axissimétrico. Em particular, a quebra destes jatos em gotas foi analisada e comparada com leis teóricas de escala e dados experimentais. Os resultados mostraram desvios inferiores a 2%. Estudos pioneiros da simulação do cone de Taylor tridimensional mostrou erros médios na morfologia da mesma ordem de grandeza.

No decorrer destas investigações foram explorados métodos avançados de análise e otimização. Entre eles destaca-se a utilização da Decomposição Modal e especificamente técnicas como POD (Proper Orthogonal Decomposition) e DMD (Dynamic Mode Decomposition). Estas técnicas oferecem uma visão aprofundada das características dominantes dos jatos e das instabilidades associadas. Adicionalmente, abordagens de aprendizagem de máquina, nomeadamente Redes Neuronais Artificiais, foram exploradas com o intuito de criar "gémeos digitais" (digital twins) para otimização dos processos envolvidos na atomização de jatos EHD.

Por fim, a tese propõe um novo modelo híbrido combinando o Volume of Fluid (VOF) com a técnica de Lagrangian Particle Tracking (LPT). Este modelo é sugerido como uma alternativa eficaz e rápida para cálculo numérico no contexto de eletrosprays, potenciando assim aplicações práticas na indústria e na investigação da compreensão da física destes escoamentos. Contribuindo significativamente para o campo da atomização de jatos EHD, oferecendo novas perspetivas e ferramentas para melhor compreensão e aplicação deste fenómeno.

Palavras-chave

Eletrohidrodinâmica; Taylor-Cone; Gotas; Volume de Fluido; Multifísica; Modelos de Ordem Reduzida (ROM); Machine Learning; Segimento Lagrangiano

Abstract

This thesis first presents a preliminary description of the existing literature on the formation of jets by electrohydrodynamic effects, usually referred to as Taylor cones. This phenomenon is multi-physical in nature and has been studied in order to effectively control the shape and size of droplets. However, it is necessary to better understand the interaction between the electric field and the flow dynamics, which is the general purpose of this work.

This thesis focuses on the atomisation of electrohydrodynamic (EHD) jets using a three--dimensional approach to investigate the instabilities associated with these jets. As part of this research, a meticulous validation of the implementation of equations coupling the Navier-Stokes equations, responsible for fluid dynamics, and Maxwell's equations for electrostatics was carried out. These validations were carried out in specific scenarios, such as the deformation of individual droplets suspended in a dielectric medium and the formation of 2D jets in axisymmetric mode. In particular, the break-up of these jets into droplets was analysed and compared with theoretical scaling laws and experimental data. The results showed deviations of less than 2%. Pioneering simulation studies of the three-dimensional Taylor cone showed average errors in morphology of the same order of magnitude.

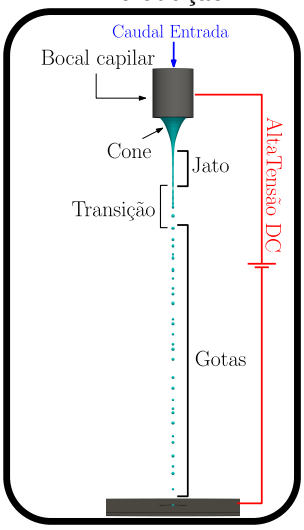
In the course of these investigations, advanced analysis and optimisation methods were explored. These include the use of Modal Decomposition and specifically techniques such as POD (Proper Orthogonal Decomposition) and DMD (Dynamic Mode Decomposition). These techniques offer an in-depth view of the dominant characteristics of jets and the associated instabilities. In addition, machine learning approaches, namely Artificial Neural Networks, were explored in order to create digital twins for simulation and prediction, as well as for optimising the processes involved in EHD jet atomisation.

Finally, the thesis proposes a new hybrid model combining the Volume of Fluid (VOF) with the Lagrangian Particle Tracking (LPT) technique. This model is suggested as an effective and fast alternative for numerical calculation in the context of electrosprays. Through these studies, the thesis makes a significant contribution to the field of EHD jet atomisation, offering new perspectives and tools for better understanding and applying this phenomenon.

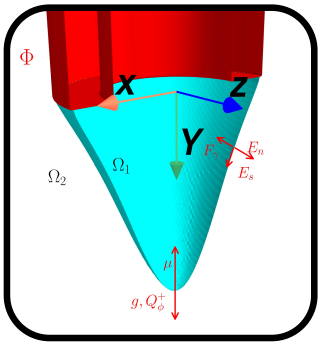
Keywords

Electrohidrodynamics; Taylor-Cone; Droplets; Multiphysics; Volume-of-Fluid; Reduced Order Model (ROM); Machine Learning; Lagrangian Particle Tracking

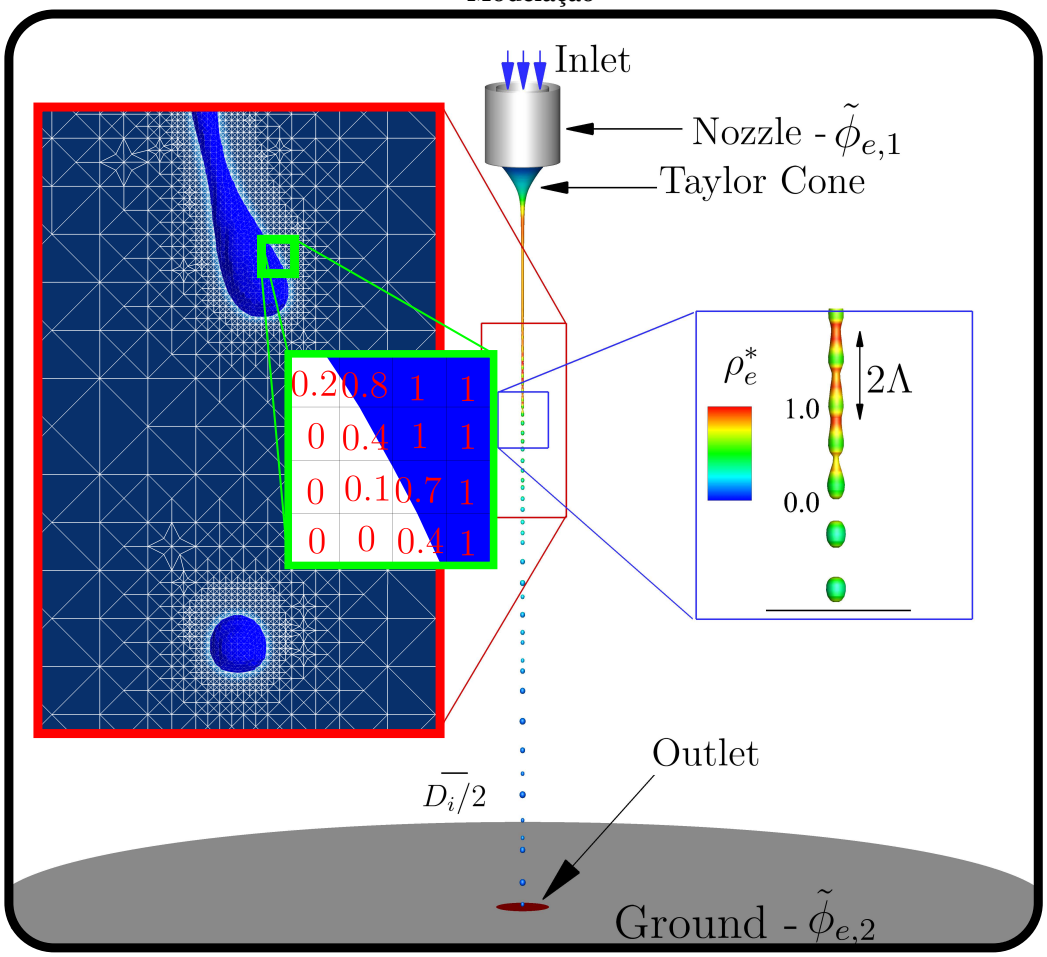
Capítulo 1
Introdução



Capítulo 2
Fundamentos



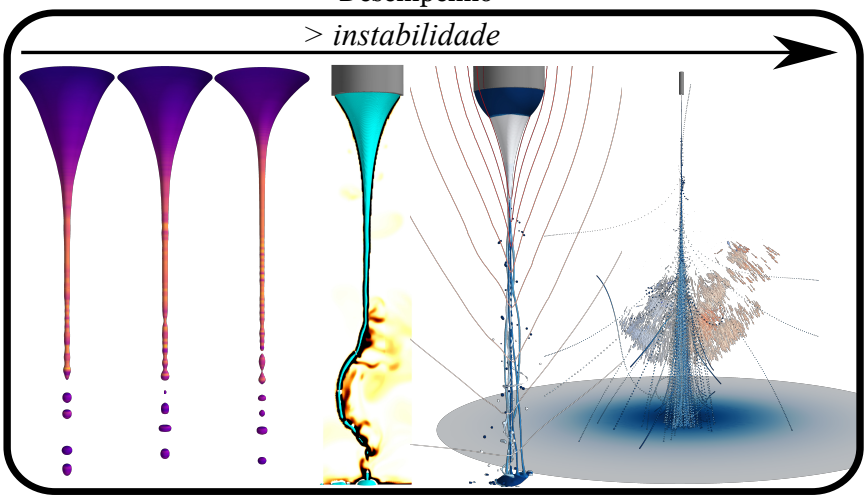
Capítulo 3
Modelação



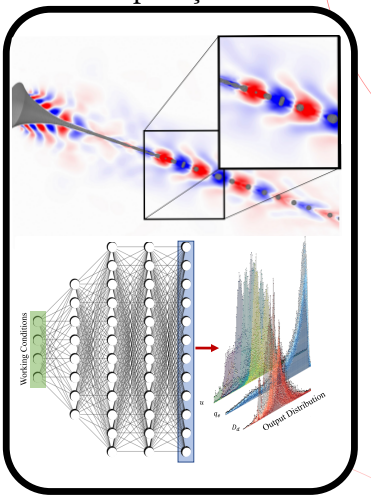
Estudo da Atomização de Jatos Eletrohidrodinâmicos

Modelação, Desempenho, Aplicações

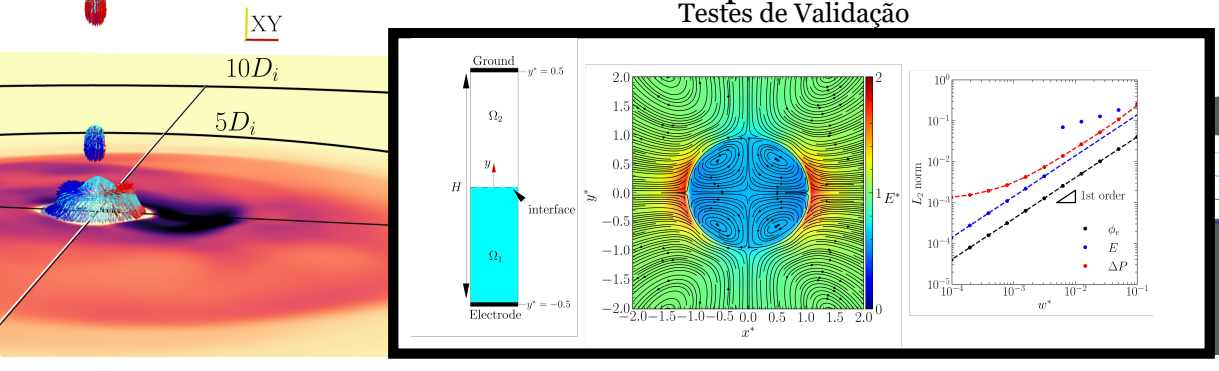
Capítulo 4
Desempenho



Capítulo 5
Aplicações



Apêndice A
Testes de Validação



Índice

1 Introdução **1**

1.1 Contexto e Definição do Problema 1

1.1.1 Modos de funcionamento de jatos de cone de Taylor 3

1.1.2 Impacto Socioeconómico dos Jatos Eletrohidrodinâmicos 5

1.2 Estado da Arte 7

1.2.1 Visão geral sobre trabalhos experimentais 7

1.2.2 Abordagens computacionais 10

1.3 Objetivos do trabalho 14

1.4 Visão geral da organização da tese 16

2 Fundamentos de Jatos Eletrohidrodinâmicos **19**

2.1 Descrição da Multifísica de Jatos Eletrohidrodinâmicos 19

2.1.1 Princípio do Cone de Taylor 19

2.1.2 Instabilidades de Rayleigh-Plateau 21

2.1.3 Instabilidades de Ondulação 22

2.1.4 Expansão de Coulomb e Formação da pluma 25

2.1.5 Atomização de jatos EHD: Formação de eletrospray 25

2.2 Equações de Governo 29

2.2.1 Conservação de massa 29

2.2.2 Conservação da Quantidade de movimento 29

2.2.3 Tensão Superficial 29

2.2.4 Equações de Maxwell. Desde a Magnetohidrodinâmica ate à Eletrohidrodinâmica 30

2.2.5 Tensor de Maxwell 31

2.2.6 Conservação da Carga Elétrica 32

2.3 Escalas Temporais e Grupos Adimensionais Relevantes 33

2.4 Leis de Escala 36

2.5 Resumo 38

3 Modelação Numérica de Escoamentos Eletrohidrodinâmicos Bifásicos **41**

3.1 Introdução 41

3.2 Método dos Volumes Finitos 43

3.2.1 Discretização do espaço 43

3.2.2 Discretização da equação de transporte 45

3.2.3 Discretização e estabilidade temporal 47

3.2.4 Condições de Fronteira 48

3.3 Tratamento da Interface (superfície livre) 50

3.3.1 Método do Volume de Fluido (VoF) 50

3.3.2 Método de compressão puramente algébrico 51

3.3.3 Método de compressão com contribuição geométrica 54
3.3.4 Tensão superficial 56
3.3.5 Ângulo de contacto 56
3.4 Outras considerações numéricas importantes 58
3.4.1 Refinamento e redistribuição da malha adaptativa 58
3.4.2 Balanço da carga computacional 58
3.4.3 Solução do sistema de equações discretas 59
3.5 O método de Partícula Discreta 60
3.5.1 Equações de governo da fase discreta 60
3.5.2 Conversão do domínio contínuo para discreto 61
3.5.3 Detalhes numéricos 65
3.6 Resumo e contribuições inovadoras dos diferentes algoritmos 65

4 Desempenho de Jatos Eletrohidrodinâmicos 71
4.1 Jatos axissimétricos 71
4.1.1 Introdução 71
4.1.2 Definição do problema axissimétrico 72
4.1.3 Detalhes numéricos 74
4.1.4 Resultados e discussão 78
4.1.5 Análise no domínio da frequência 90
4.1.6 Resumo 93
4.2 Instabilidades tridimensionais 95
4.2.1 Introdução 95
4.2.2 Definição do problema tridimensional 97
4.2.3 Validação do modelo 98
4.2.4 Resultados e discussão 102
4.2.5 Resumo 116
4.3 Atomização do jato e Formação de Plumas 119
4.3.1 Modelação híbrida VOF-LPT 119
4.3.2 Definição do problema 119
4.3.3 Validação 121
4.3.4 Caracterização das gotas emitidas 124
4.3.5 Campos VoF e LPT 125
4.3.6 Deposição da fase líquida 125
4.3.7 Resumo 127

5 Exemplos de Aplicações de Jatos Eletrohidrodinâmicos 131
5.1 Os Modelos de Ordem Reduzida baseados em Decomposição Modal 131
5.1.1 Introdução à Análise de Componentes Principais (PCA) 132
5.1.2 Proper Orthogonal Decomposition (POD) 133
5.1.3 Resultados para o Jato EHD Axissimétrico 136
5.1.4 Decomposição de Modos Dinâmicos (DMD) 143
5.1.5 Modelos de Ordem Reduzida baseados em POD 149

5.1.6 Observações Finais 150
5.2 Micro-propulsão coloidal 155
5.2.1 Proposta de grelha dupla de extração/aceleração 155
5.2.2 Efeito da grelha de aceleração 157
5.2.3 Métodos Machine Learning para otimização 162

6 Conclusões **173**
6.1 Resumo dos principais resultados 173
6.2 Implicações práticas e teóricas dos resultados 174
6.3 Sugestões para trabalhos futuros 175

Bibliografia **179**

A Publicações **195**
A.1 Artigos em revistas internacionais com arbitragem científica 195
A.2 Artigos em conferências internacionais com arbitragem científica 195
A.3 Posters científicos 196

B Validação do modelo numérico de meio contínuo **197**
B.1 Ordem de Precisão da Discretização 197
B.2 Deformação da Interface e Erro associado 201
B.3 Resumo dos Resultados de Validação 207

C Scripts para Simulação de Jatos EHD **209**
C.1 *Scripts* automatizados para modelação de Jatos EHD 209
C.1.1 Caso de Jato Axissimétrico 209
C.1.2 Caso Tridimensional 211

D Propostas de Estudos/Aplicações Futuras **213**
D.1 Proposta A - *Eletrospinning* sem bocal 213
D.2 Proposta B - Deteção online de perturbações ao escoamento 213
D.3 Proposta C - Aceleração de simulação de eletrospray 214

Lista de Figuras

1.1 Cone de Taylor. Fotografia com indicação dos diferentes regimes por que passa o escoamento. Esquema da operação do cone de Taylor em modo estável. 2

1.2 Visualização experimental de três diferentes modos de funcionamento do jato EHD, Dripping, Cone-Jato e Multi-Jato. Estes modos estão ordenados segundo o potencial elétrico aplicado no bocal. Na fotografia mais à direita temos a formação de dois jatos no bocal e um deles abre-se outros jatos finos, esta abertura é delimitada pelas linhas a vermelho. 4

1.3 Ilustração da comparação entre a tradicional *dripping* de gotas e jatos EHD com cone de Taylor. Imagem adaptada de [1]. 5

1.4 (a) Modo estável de deposição contínua (b.1) Formação de eletrosprays levando a uma deposição do tipo (b.2). (c.1) Formação de *electrospinning* levando a uma deposição de tipo (c.2), (d.1) Ilustração do funcionamento de jatos coaxais para deposições de microesferas do tipo (d.2) onde as zonas verdes são a solução ativa A encapsulada pela solução B (fonte de (b.2 e c.2) [2] e de (d.2) [3]). 6

1.5 Geometria base para os casos de teste de jatos líquidos eletrohidrodinâmicos, contendo: Um bocal capilar, definido para um diâmetro interno e externo, que está distanciado de um prato coletor. 8

2.1 Esquema das forças eletrostáticas e hidrodinâmicas a atuar na formação de um cone de Taylor. 20

2.2 Demonstração da instabilidade de onda devido à tensão superficial (a) ilustração dos raios das instabilidades [4] e (b) pressão nos nós e anti-nós da onda [5]. 22

2.3 Esquema das forças atuantes e que influenciam o jato na formação da primeira onda (curva abc). 23

2.4 Visualização do campo vetorial do campo elétrico e da expansão eletrostática. No meio do campo estão gotas coloridas pela densidade pontual de carga elétrica. 26

2.5 Demonstração da formação inicial de *eletrospray* com a instabilidade de *whipping* formando pequenas gotas (compare-se com o diâmetro do bocal de entrada D_i). As linhas de campo mostram o campo elétrico e como as gotas (que estão eletricamente carregadas como mostra a janela de zoom) seguem este campo vetorial. 28

2.6 Diagrama representando as inter-relações entre inércia, capilaridade, viscosidade, e força eletrostática com seus respetivos tempos de relaxação. . . 34

3.1 Ilustração do processo de discretização do espaço contínuo em discreto, as equações de governo passam a ter a forma matricial que é discreta e correspondem aos diferentes pontos da malha computacional. 42

3.2 Volume de controlo típico utilizado numa discretização em volumes finitos, onde $\mathbf{d}_f$ é o vetor que representa a distância entre o centróide P e o centróide N, e $\mathbf{S}_f$ é o vetor normal à face f com módulo igual à área da face e a apontar para fora do VC que possui o ponto P. Estas duas células de forma arbitrária são separadas por uma face f. As grandezas primárias são definidas nos centros das células C_P e C_N, as grandezas secundárias podem ser definidas nos centros das faces C_f 44

3.3 Representação de uma célula de calculo na fronteira. 49

3.4 Esboço do clássico problema do jato em cone de Taylor e exemplificação do método de Volume de Fluido (VoF) utilizado. O líquido no interior do capilar é conduzido por um campo elétrico externo constante. Os valores da fração de fase são representativos. 51

3.5 Visualização da compressão (1D) da interface com o esquema MULES através do cálculo do fluxo na célula i. 53

3.6 Esquema ilustrativo do corte feito pelo esquema *isoAdvector* numa célula computacional poliédrica, bem como a propagação da *isoface* estimada pela velocidade envolvente em três diferentes tempos de cálculo para um único passo de tempo. 55

3.7 Visualização da deposição de gotas líquidas no coletor de um *electropray*. A janela de aproximação mostra os parâmetros utilizados na consideração do ângulo de contacto do líquido com a superfície, sendo θ o ângulo de contacto prescrito, $\mathbf{n}_b$ o vetor normal à fronteira (neste caso a parede do coletor) e $\mathbf{n}_\alpha$ o vetor normal à interface VoF no ponto de contacto com a parede. 57

3.8 Redistribuição da malha para balanceamento da carga após o refinamento. Após o refinamento, as cargas associadas a cada um dos processadores são diferentes. O desequilíbrio é reduzido movendo células entre subdomínios. 59

3.9 (esquerda) Visualização de um plano a cortar uma gota a que voa no domínio de cálculo, colorido pela função α e com as linhas brancas a mostrar a malha computacional. (direita) Demonstração de uma gota não-esférica com uma esfericidade $\Psi_p > 1$ e uma gota esférica $\Psi_p \approx 1$. 62

3.10 Visualização da conversão de uma gota do domínio VoF (Euleriano) para o domínio LPT (Lagrangiano). A malha computacional é recalculada pois o método LPT não tem a interface para refinar. 66

3.11 Fluxograma do algoritmo de cálculo baseado unicamente na hipótese de meio contínuo, o fluxograma é igual para os nossos modelos interFoamEHD e interISOFoamEHD, a diferença entre os dois é apenas a escolha pelo esquema de compressão da interface VoF. As componentes a verde são as nossas contribuições adicionais ao modelo base e as a vermelho foram componentes modificadas. 68

3.12 Fluxograma do novo algoritmo de cálculo baseado na hipótese de meio contínuo com a conversão das pequenas gotículas para o domino lagrangiano, para que sejam tratadas pela hipótese discreta. 69

4.1 Jato eletrohidrodinâmico axissimétrico com cone de Taylor estável. 72

4.2 Problema do jato eletrohidrodinâmico. Esquema da geometria com indicação do potencial elétrico e a referência às condições de fronteira aplicadas. 73

4.3 Ilustração do refinamento da malha, com os três diferentes tamanhos de malha computacional testados, sendo a região (1) o tamanho inicial e (3) a grelha mais refinada que é 4 vezes mais pequena do que (1). (i) são as gotículas principais que têm entre si (ii) gotículas satélites. 76

4.4 Iso-valores da fração de volume para os limites da interface. 79

4.5 Campo vetorial da (a) força elétrica volumétrica $\mathbf{f}_e$ para o cálculo obtido com o esquema MULES e com o isoAdvector. As linhas de isovalor são para a fração volumétrica. (b) Velocidades coloridas pelo módulo da velocidade na direcção axial normalizada pela velocidade de entrada. A linha preta é a interface. [6] 80

4.6 Evolução temporal do jato do cone de Taylor desde a condição inicial até ao jato estável. Para um potencial elétrico aplicado de $4\mathrm{kV}$ e $5Q_0$ [5]. . . . 81

4.7 Validação do tamanho da gota vs. resultados experimentais. (a) Histograma para uma condição de trabalho $4 - 0 - 0\,\mathrm{kV}$ e caudal de entrada de $5Q_0$. (b) Variação do tamanho da gota com o caudal de entrada. 82

4.8 (a) Resultados para o cálculo do diâmetro principal das gotículas, ajustando a contagem de gotículas a uma curva gaussiana normal. (b) Medições do diâmetro das gotas para diferentes condições de trabalho e apresentação de um estudo comparativo com os resultados de [7]. 83

4.9 Resultados da simulação para o jato do cone de Taylor com desagregação em gotículas. Os resultados mostram a isosuperfície para uma fração de fase de 0,5, correspondente à superfície livre do jato de líquido. A isosuperfície é colorida pela densidade de carga ρ_e. São efetuadas duas ampliações para ver a quebra. As barras horizontais cinzentas são barras de escala que correspondem a $400\ \mu\mathrm{m}$ na imagem correspondente. Estes resultados são para a condição de funcionamento de $83Q_0$. 84

4.10 (a) Média temporal da magnitude da densidade de carga elétrica ao longo do eixo y, para diferentes condições de caudal de entrada. (b) Instantâneos temporais da força elérica volumétrica, na interface do líquido, para um tempo de escoamento (b-esquerda) $3\tau_\gamma$ e (b-direita) $10\tau_\gamma$. Estes resultados são para a condição de funcionamento de $83Q_0$. (b) Distribuição da pressão no jato 85
4.11 Visualização de diferentes campos e linhas de corrente. (esquerda) Campo do potencial elétrico com as algumas iso-linhas do mesmo campo. (centro) Campo colorido com o módulo do campo elétrico e as correspondentes linhas de corrente tangenciais a cada ponto do campo. (direita) Campo colorido pela densidade de carga elétrica e linhas de corrente tangenciais ao campo vetorial da velocidade. 86
4.12 Linhas de campo para o campo elétrico E_f (a verde) e para o campo da velocidade (a vermelho) 87
4.13 Dinâmica da densidade da carga elétrica no domínio. Para um potencial elétrico aplicado de $4\,\mathrm{kV}$ e $5\,\mathrm{nL\,s^{-1}}$. O campo de carga elétrica delimita-se entre $[0,1]\,\mathrm{C\,m^{-3}}$ [5]. 87
4.14 Distribuição da densidade de carga elétrica na direção radial, para $y^* = 1$. Os pontos vermelhos marcam a região da fração de fase $\alpha \in [0{,}1; 0{,}9]$ que é onde a interface está centrada. 88
4.15 (esquerda) Ao lado está representada a interface para o caso de $75Q_0$. As linhas cinzentas representam o valor instantâneo para $10\tau_\gamma$. Estes resultados são para a condição de funcionamento de $83Q_0$. (b) Iso superficies para os caudais mencionados. 89
4.16 Distribuição da pressão ao longo da superfície livre do jato para dois caudais diferentes de entrada. 90
4.17 (esquerda) Flutuação do comprimento do jato, para um caudal de entrada igual a $83Q_0$. A cinzento representa-se o comprimento do jato contínuo e a vermelho os dados amostrados para as análises FFT. O f_{filt} é composto pelas seguintes frequências: $\{132{,}8; 333{,}3; 1032{,}0\}\mathrm{Hz}$. (direita) Espectro PSD da flutuação de L_{jet} para diferentes caudais de entrada. 91
4.18 (a) PSD da flutuação do comprimento do jato para as diferentes condições de trabalho em função do número de Stroudal. Na região (i) forma-se um jato instável, misturado com um regime de imersão. (b) Frequência dominante da estabilidade do jato para as diferentes condições de funcionamento (a linha preta é uma curva de ajuste da lei de potência aos pontos de $37\phi_{e,0}$). 92
4.19 (a) Flutuação do valor médio da densidade de carga elétrica na saída, para o caso $37\phi_{e,0}$ e $83Q_0$. (b) PSD da flutuação ρ_e. Resultados para uma amostragem de $\approx 0{,}3(\Delta t_s \tau_\gamma)$ durante uma formação estável de um cone de Taylor e emissão de jato. A cinzento estão representados os dados em bruto e a vermelho os dados produzidos pela frequência dominante. 93

4.20 Esquema da montagem física, em que a parede do bocal capilar está a uma tensão elevada Φ em relação a um coletor de terra. Observa-se um olhar mais atento ao bocal capilar, mostrando um diâmetro interior (D_i) e um diâmetro exterior (D_o). A superfície azul representa a interface líquida. . 96
4.21 (a) Malha computacional num plano de corte YoZ. (b) Representa-se a azul a condição inicial para a interface $\sum_0$ e a vermelho o bocal de entrada. . . 100
4.22 Resultados dos estudos de sensibilidade da malha. Comparação da isosuperfície para diferentes resoluções da malha δ_x [μm], resultados representados para o tempo $t = 0{,}7$ ms. 101
4.23 Comparação entre a superfície livre do líquido obtida com os nossos cálculos e os estudos anteriores para validação do modelo EHD. Nos nossos resultados, os pontos da superfície são coloridos pela coordenada do ponto no eixo z. 102
4.24 Uma sequência temporal da superfície iso 3D ($\alpha = 0{,}5$) num plano de visualização xy. A superfície é colorida pela velocidade u^*/u_{in}, onde o módulo da velocidade u é multiplicado por $u^* = 1000u$. 103
4.25 Evolução da variação da posição axial da ponta (ΔL_t) e do centróide da fase líquida (ΔL_c) no domínio do líquido, desde a condição inicial até à deposição no solo (preto). Evolução da velocidade na ponta do líquido (verde). 104
4.26 Visualização do padrão instantâneo das linhas de corrente para (esquerda) a velocidade para a emissão do jato cónico ($t = 0{,}7$ ms) e (direita-acima) o campo elétrico e (direita-baixo) o campo de velocidade na região da gota ($t = 2{,}7$ ms $= 10\tau_h$) . Para as duas imagens da direita a largura das linhas é proporcional ao módulo do respetivo campo assinalado em cada. A linha vermelha quebrada é a forma da gota da imagem do estudo experimental (figura 1 (c) de [8]). 105
4.27 Variação da evolução temporal da velocidade (verde) da ponta da fase líquida com um aumento do potencial elétrico $Ca_E \in \{0{,}26; 0{,}32; 0{,}38; 0{,}42\}$ (na direção das setas) e (preto) da altura média do líquido, para os potenciais elétricos correspondentes. São apresentados dois instantâneos da isosuperfície (i) e (ii) para demonstrar o tipo de comportamento nas duas regiões, a região de jato t_j e a região de recuo t_r. 107
4.28 Variação do perfil de velocidade da superfície com um aumento do potencial elétrico $Ca_E \in \{0{,}26; 0{,}32; 0{,}38; 0{,}42\}$ (na direção da seta curva). Na parte superior as duas figuras representam o padrão instantâneo das linhas de corrente do campo de velocidade e, a vermelho, a isocurva da interface. A comparação é feita para o mesmo tempo de escoamento de $t = 0{,}4\tau_h$. . . 107
4.29 Efeito do potencial elétrico externo aplicado na corrente elétrica do jato, para o mesmo Ca_E que anteriormente. 108
4.30 Evolução temporal do jato, para o tempo de ejeção, colorido pela densidade da carga elétrica. 109

4.31 Estruturas ISO tridimensionais da densidade de carga elétrica $\rho_e/|\bar{\rho}_e| : \{0{,}5;$ $1{,}0;\ 1{,}5\}$, no tempo $t/\tau = 4{,}5$ e $Ca_E = 0{,}26$. A circunferência preta representa uma distância radial de $10D_i$. Resultado para $Ca_E = 0{,}26$ 110

4.32 Instantes de três momentos diferentes: (a) O impacto inicial do jato; (b) a deposição simétrica do jato imediatamente antes do impacto da segunda onda em (c). O chão é colorido pela densidade de carga elétrica e o campo vetorial da velocidade na interface do líquido é mostrado como ($U^* = 1000U$). Uma linha branca mostra o deslocamento do piso no momento correspondente (o deslocamento é considerado zero no momento do primeiro contacto do líquido com o prato coletor, correspondente a $t_0\tau = 1{,}0$). Condições de $Ca_E = 0{,}26$ e $u_s = 20\mathrm{mm\,s^{-1}}$. 112

4.33 Evolução espaço-temporal da superfície livre do jato líquido para o Caso II. São apresentadas duas vistas perpendiculares, uma vista lateral (XY) e uma vista superior (ZX) na região da gota. A iso-superfície é colorida pelo módulo da velocidade ($u^* = 1000u$). A linha vermelha horizontal marca a região de início do chicote de ondas ($y/D_i = 3{,}44$) e as linhas vermelhas diagonais mostram a translação do nó do chicote de ondas. Neste caso a condição de trabalho é $Ca_E = 0{,}42$ e $We_E = 20{,}45$. 113

4.34 (a) Iso-superfície do jato líquido, apontando para o nó do chicote, colorida pela densidade de corrente elétrica normalizada $\mathbf{D} = \rho_e \boldsymbol{u}$. 114

4.35 Corte bidimensional plano, mostrando o padrão instantâneo das linhas de corrente do campo elétrico $\boldsymbol{E}$ e as iso-linhas do potencial elétrico ϕ_e.. . . . 115

4.36 Padrão instantâneo das linhas de corrente do campo de velocidades e das iso-linhas da vorticidade $\omega = \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial u_y}{\partial y}$. 116

4.37 Visualização da dinâmica completa do jato líquido com números crescentes de Ca_E. Iso-superfícies coloridas pelo tempo t_c. O tempo total de sobreposição é de $1{,}5$ ms. A placa do coletor é colorida pela intensidade do campo elétrico $\boldsymbol{E}$. 117

4.38 Resumo gráfico das instabilidades tridimensionais estudadas com visualização das instabilidades do efeito de chicote e o campo elétrico. 118

4.39 Esquema da deposição por eletrospray, com as diferentes regiões de interesse.120

4.40 Esquema do domínio do caso de teste para a atomização do jato, com a menção às condições de fronteira Γ_i, Γ_e, Γ_c e Γ_f. 120

4.41 Comparação entre os resultados do presente modelo e os experimentais [9] e numéricos [10], para as variáveis velocidade do escoamento e das gotas. . 122

4.42 Comparação entre os resultados obtidos e os experimentais [9], neste caso para o módulo do campo elétrico. 123

4.43 Histograma da distribuição do diâmetro das gotículas, colorido pela sua esfericidade. 124

4.44 Histograma da distribuição da velocidade das gotículas, colorido pela sua esfericidade 125

4.45 Evolução inicial do eletrospray, sendo que, do lado esquerdo, temos os vetores da velocidade de cada gota convertida para o domínio LPT e o coletor colorido pela intensidade do campo elétrico. Para cada tempo mostra-se, do lado direito, o zoom ao jato líquido. 126

4.46 Deposição das gotículas formadas pelo eletrospray, onde em (a) visualiza-se a evolução temporal e a dinâmica das cargas elétricas e em (b) se dá uma visão geral da deposição, com as linhas brancas a mostrar o refinamento da malha computacional. 128

5.1 Ilustração dos instantes temporais da velocidade axial e da densidade de carga elétrica, para formar a matriz de dados **S**. 134

5.2 Teste de sensibilidade para os autovalores de energia dos modos POD, para diferentes números de Stroudal de amostragem $St_s = f_s D_i / u_i^E$ iguais a 0,053 (preto), 0,106 (azul), 0,212 (verde) e 0,424 (vermelho). Resultados para um caudal de entrada fixo igual a $83Q_0$, $f_s = 1/\delta t_s$ é a frequência de amostragem de um intervalo de tempo fixo igual a $8\ \mathrm{ms}$. 137

5.3 Energia acumulada do valor próprio λ_i para a (a) velocidade axial e (b) densidade de carga elétrica, para os cinco modos POD mais importantes e distintos. 138

5.4 Campo normalizado espacialmente do primeiro e segundo modo POD (φ_1 e φ_2 respetivamente) para as flutuações de velocidade axial. 140

5.5 Campo normalizado espacialmente do primeiro e segundo modos POD (φ_1 e φ_2 respetivamente) para as flutuações da densidade de carga elétrica. . . 141

5.6 Análise PSD dos coeficientes temporais dos primeiros oito modos POD. Resultados para o caso de $83Q_0$ e $37\phi_{e,0}$ e para os campos (a) u_y e (b) ρ_e. A linha vermelha representa a frequência obtida na secção anterior a partir da análise FFT do comprimento do jato e as linhas a traço interrompido as imagens correspondentes. 142

5.7 Teste de sensibilidade dos valores próprios de energia, para os modos DMD nas diferentes frequências de amostragem. As frequências de amostragem são $f_s = \{f_{s,1}; f_{s,2}; f_{s,3}; f_{s,4}\} = \{50; 25; 12{,}5; 6{,}25\}\ \mathrm{kHz}$. 145

5.8 Erro de aproximação da matriz em função de diferentes parâmetros de Tikhonov e diferentes tolerâncias do cálculo da SVD. 146

5.9 Amplitudes normalizadas dos modos DMD para diferentes calibrações de tolerância $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \{10^{-5}; 10^{-4}; 10^{-3}\}$ (correspondendo às marcas $\triangle; \times; \circ$) e deslizamento de tempo $d = \{1; 4; 6; 8\}$ (correspondendo às cores preto, verde, azul, laranja). 147

5.10 Campo normalizado espacialmente de frequências características do modo DMD. Normalização pelo valor máximo do campo. 148

5.11 Campo normalizado espacialmente das frequências características do modo DMD. Normalização pelo valor máximo do campo. 148

5.12 Valores próprios do método DMD e o desvio normal do círculo unitário, para (a) a velocidade axial e (b) a flutuação do campo da densidade de carga elétrica. 149
5.13 Erro relativo global da projeção ROM e a solução FOM obtida através da norma do núcleo da matriz. As linhas a traço interrompido mostram a posição para qual o erro é 5%. 150
5.14 Análise no domínio da frequência dos componentes temporais para os n-ésimos modos POD, respetivamente para as flutuações do campo da: (a) velocidade; (b) densidade de carga elétrica. 151
5.15 Comparação de um instante do *FOM* e do *ROM* para o campo de velocidade. Os campos ϕ são normalizados com a norma L_1. 152
5.16 Comparação de um instante do *FOM* e do *ROM* para o transporte da densidade de carga eléctrica. Os campos ϕ são normalizados com a norma L_1 . 152
5.17 Visualização do jato líquido e dos modos para a velocidade e para a carga elétrica. 153
5.18 Esquema do caso de estudo, da transição cone-jato de Taylor e da emissão de gotículas, com grelha dupla. 156
5.19 Malha computacional final sendo as distâncias (d_1, d_2, d_3) iguais a $(D_o, 2D_o, 4D_o)$. 158
5.20 Visualização das linhas de corrente do campo elétrico para os casos de teste com a combinação de potencial elétrico dado por: Φ_0, Φ_1(a) $4-0$ (a) $5-1$ (a) $4-0$ e (c) $6-2\,\mathrm{kV}$. A espessura das linhas de corrente representadas é diretamente proporcional ao módulo do campo elétrico. Resultados para um caudal de entrada de $5\,\mathrm{nL\,s^{-1}}$. 159
5.21 (a)-(c) Comparativo entre a velocidade das gotículas para diferentes potenciais elétricos, designados por Φ_0, Φ_1. (d) Reconstrução da interface tridimensional com as isolinhas do potencial elétrico Resultados para um caudal de entrada de $5\,\mathrm{nL\,s^{-1}}$. 160
5.22 Comparação entre o campo elétrico e as linhas de corrente de velocidade geradas para diferentes condições de funcionamento, identificadas como Φ_0, Φ_1. Resultados para um caudal de entrada de $5\,\mathrm{nL\,s^{-1}}$. 161
5.23 Comparação da velocidade da gota nas duas regiões de extração e aceleração, para diferentes condições de aceleração gravitacional. Resultados para um caudal de entrada de $5\,\mathrm{nL\,s^{-1}}$. 162
5.24 Ilustração da metodologia de trabalho da ANN adotada no presente trabalho. (setas azuis) fluxo de trabalho CFD (setas vermelhas) fluxo de trabalho ANN. Nota: DBSCAN baseado em [11]. 163
5.25 Ilustração metodológica da rede neuronal convolucional profunda unidimensional (1D CNN) 165
5.26 Distribuição do (a) diâmetro da gota e (b) carga elétrica para a base de dados completa. A distribuição é normalizada pelo valor máximo. 167

5.27 Processo de treino da (a) ANN (b) CNN com os diferentes números de neurónios para análise da perda do conjunto de treino $\mathcal{L}_{train}$ e validação $\mathcal{L}_{val}$. Para uma arquitetura com 4 camadas ocultas $N_{\text{neurnios}} = 256$ 168
5.28 Previsão do diâmetro das gotículas médias geradas ao longo da gama de caudal de entrada aceitáveis com a ANN e o CNN para um número máximo de neurónios por camada de (a) 256 e (b) 512. 169
5.29 Espaço 3D da aceleração das gotas calculada como a diferença entre a velocidade na região de aceleração e a extração $U_2 - U_1\,\mathrm{m\,s^{-1}}$. 170
5.30 Espaço 3D do diâmetro médio da gota para o caso de $-1G$ e $0G$. 170
5.31 Previsão do impulso em diferentes condições de aceleração gravitacional. . 170
5.32 Mapa de calor de correlação das variáveis de entrada e saída para a base de dados CFD (a) e para o modelo ML (b) (com 1000 pontos previstos) 171

B.1 Caso de validação I – (a) Esquema geométrico da configuração dos casos de teste da camada planar. A geometria tem uma largura de $H/10$. (b) Potencial elétrico através do eixo y para o caso condutor-condutor (cc) e dielétrico-condutor (dc). A condição de volume inicial é definida como $\sum_{t_0} : \{y < 0\}$. 198
B.2 Case de validação I - Sensibilidade da norma L_2 em função da espessura da interface normalizada. 200
B.3 Caso de validação II - Esquema da geometria do caso de teste para a deformação de uma gota singular suspensa. A condição inicial para o volume da esfera é dado por $\sum_{t_0} : \left\{x^{*2} + y^{*2} < 1\right\}$. 202
B.4 É calculada uma representação do campo elétrico para a malha mais refinada. (a) A comparação entre a solução analítica e os resultados numéricos dos pontos amostrados em diferentes direções radiais dentro do domínio. Valores para um caso com $Ca_E = 0{,}1$. (b) Variação da deformação com diferentes números de capilaridade elétricos, em comparação com as duas soluções analíticas. 203
B.5 Valor do tensor de tensão de Maxwell (MST) na interface da gota. (R,Q,Ca_E) = ($3{,}0; 2{,}0; 0{,}1$). 206
B.6 Resultados para um caso com (R,Q,Ca_E) = ($3{,}0; 2{,}0; 0{,}1$), em que (a) é o campo vetorial da força elétrica na interface da gota (na isosuperfície de $\alpha = 0{,}5$) para o tempo do passo final, $t/\tau_\gamma = 100$ (solução estável). Utilizando uma linha interrompida, é também mostrada a interface inicial da gota. . 206
B.7 Resultados para um caso com (R,Q,Ca_E) = ($3{,}0; 2{,}0; 0{,}1$), onde (b) Comparação do comportamento para um potencial elétrico crescente (linhas contínuas) e, aquele com a aplicação instantânea do campo elétrico (linhas interrompidas). 207

C.1 Modelo axissimétrico para o caso base e para o de duas grelhas extração/aceleração. 210
C.2 Geometria do caso tridimensional com as respetivas condições de fronteira. 211

D.1 Esquema ilustrativo da tecnologia de *eletrospinning* sem bocais, com cilindro rotativo. À esquerda vemos as nossas simulações preliminares, onde mostramos as linhas de corrente do campo vetorial da velocidade e no canto para o campo elétrico gerado. 213
D.2 Esquema do procedimento de treino de uma arquitetura de um modelo de aprendizagem de máquina baseada em células de correlação temporal (LSTM). 213
D.3 Esquema da proposta de aplicação da deteção *online* de perturbações no escoamento EHD de forma a classificar o tipo de problema. 214

Lista de Tabelas

1.1 Condições geométricas para diferentes casos de teste disponíveis na literatura. Todas as dimensões estão em mm. 9
1.2 Condições de funcionamento de diferentes casos de teste da literatura. . . 9
1.3 $\rho\ \mathrm{kg\,m^{-3}}$, $\mu\ \mathrm{mPa\,s}$, $\gamma\ \mathrm{mN\,m^{-1}}$, σ_e $\mu\mathrm{S\,m^{-1}}$ and ε. O subscrito i refere-se ao líquido liq_i. 11

4.1 Propriedades hidrodinâmicas e elétricas dos fluidos utilizados [7]. 73
4.2 Sensibilidade da grelha ao diâmetro da gota. Erro relativo em comparação com os dados experimentais de [7]. A interpolação GCI de d_s tem um $q = 5{,}1$ e a de d_d tem um $p = 1{,}8$. É utilizado um fator de segurança $F_s = 1{,}25$. . 76
4.3 Comparação entre os valores experimentais do diâmetro da gota e da corrente gerada com as simulações numéricas para as duas formulações diferentes de cálculo das propriedades elétricas. Resultados para três caudais de entrada diferentes. 77
4.4 Propriedades hidrodinâmicas e eléctricas dos fluidos [8]. 98
4.5 Propriedades e constantes do problema de teste, que incluem as propriedades hidrodinâmicas e elétricas [9] do sistema de duas fases e propriedades geométricas fixas. ε_0 é a permissividade do vácuo $8{,}85\ \mathrm{pF\,m^{-1}}$, para o qual $\varepsilon_{r,i} = \varepsilon_i/\varepsilon_0$. 121

5.1 Resumo da energia do POD, com o $\varphi_i^{\phi}(E_i \approx 99\%)$ como o modo em que a energia acumulada dos modos atinge 99% de toda a energia neles contida, e $E^{\phi}_{(1+2)}$ como a fração da energia acumulada contida no primeiro e segundo modos. 139
5.2 Propriedades e constantes do problema, que incluem as propriedades hidrodinâmicas e elétricas [7] do sistema bifásico e respetivas propriedades geométricas. 157
5.3 Detalhes da arquitetura do modelo $1D-CNN$ aqui proposto: $CNN1(L1-L6)$; $CNN2(L1-L7)$ e $CNN3(L1-L8)$. 165

Lista de Acrónimos

ANN	Rede Neuronal Artificial (Artificial Neural Network)
CNN	Rede Neuronal Convolucional (Convolutional Neural Network)
CFD	Dinâmica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics)
CFL	Courant-Friedrichs-Levy
CMAST	Center for Mechanical and Aerospace Sciences and Technology
DMD	Dynamic Mode Decomposition
EHDA	Atomização Eletrohidrodinamica
EHD	Eletrodidrodinâmica
FFT	Transformada Rápida de Fourier (Fast Fourier Transform)
FCT	Fundação para a Ciência e a Tecnologia
GCI	Índice de Convergência de Malha
HODMD	Higher Order Dynamic Mode Decomposition
LPT	Seguimento Lagrangiano de Partículas
LSTM	Long short-term memory
MHD	Magnetohidrodinâmica
ML	Aprendizagem de máquina (Machine Learning)
MST	Tensor de tensões de Maxwell
PCA	Análise das Componentes Principais
POD	Proper Orthogonal Decomposition
ROM	Modelo de Ordem Reduzida (Reduced Order Model)
SVD	Singular Value Decomposition
UBI	Universidade da Beira Interior
VOF	Volume de Fluido
WAM	Interpolação aritmética
WHM	Interpolação harmónica

Nomenclatura

Letras latinas	**Descrição**	**Unidade**
D_c	Diâmetro do coletor/extrator	$[\mathrm{m}]$
D_d	Diâmetro da gota emitida	$[\mathrm{m}]$
D_i	Diâmetro interno do bocal	$[\mathrm{m}]$
D_j	Diâmetro do jato emitido	$[\mathrm{m}]$
D_o	Diâmetro externo do bocal	$[\mathrm{m}]$
f_s	Frequência de amostragem	$[\mathrm{Hz}]$
H	Distância ponta do bocal ao extrator	$[\mathrm{m}]$
I_e, i_e	Corrente elétrica	$[\mathrm{A}]$
L, L_i	Comprimento do bocal de entrada	$[\mathrm{m}]$
L_j	Comprimento do jato emitido	$[\mathrm{m}]$
Ψ_p	Esfericidade da gota	[-]
q_R	Limite de Rayleigh para a carga elétrica	$[\mathrm{C}]$
u_d	Velocidade da(s) gota(s)	$[\mathrm{m\,s^{-1}}]$
u_i	Velocidade de entrada do escoamento no bocal	$[\mathrm{m\,s^{-1}}]$
Q_i	Caudal de entrada do escoamento no bocal	$[\mathrm{m^3\,s^{-1}}]$
Letras gregas		
Γ	Face de fronteira	[-]
Ω	Domínio espacial	$[\mathrm{m}]$
Φ_0	Potencial elétrico aplicado ao eletrodo	$[\mathrm{V}]$
Ψ_p	Esfericidade da gota	[-]
τ	Escala temporal	[s]
μ	Viscosidade dinâmica	$[\mathrm{Pa\,s}]$
ρ	Massa específica	$[\mathrm{kg\,m^{-3}}]$
σ_e, σ	Condutividade elétrica	$[\mathrm{S\,m^{-1}}]$
θ_T	Ângulo do cone de Taylor	$[^\circ]$
ε_0	Permissividade elétrica do vácuo	$[\mathrm{F/m}]$
ε_r	Permissividade elétrica relativa	[-]
γ	Tensão superficial	$[\mathrm{N\,m^{-1}}]$

Índices

0, 1, 2	Total, fase 1, fase 2	[-]
Ca	Número de capilaridade	[-]
Cae_E	Número de capilaridade elétrico	[-]
Oh	Número de Ohnesorge	[-]
Re	Número de Reynolds	[-]
Re_E	Número de Reynolds elétrico	[-]
St	Número de Stokes	[-]
We	Número de Weber	[-]
x, y, z	Eixo ou direção x, y e z	[-]

Capítulo 1

Introdução

Este capítulo apresenta:

- A definição do problema a estudar;
- O estado da arte do seu estudo através de revisão da literatura;
- A revisão da literatura de métodos avançados para análise e otimização;
- O planeamento, objetivos e principais contribuições do trabalho;
- A organização e estrutura da tese.

1.1 Contexto e Definição do Problema

Os jatos eletrohidrodinâmicos (EHD) são criados, na sua forma mais simples, através de um pequeno bocal, no qual emerge uma gota de líquido com certas propriedades elétricas, ao qual é aplicada uma alta tensão. Esta tensão é aplicada entre o bocal e um coletor, sendo então possível formar um jato fino devido à ação eletroestática e, eventualmente, também à de origem gravítica. Este fenómeno é comummente referenciado como "cone de Taylor". Os cones de Taylor têm distintos modos de funcionamento, sendo estes estudados consoante as diferentes formas de operação. O modo de funcionamento mais comum é o de jato contínuo [12], entre o cone e o coletor, contudo, e dependendo das condições, estes jatos podem quebrar-se em pequenas gotas, veja-se a Figura 1.1 .
A formação de gotas que emergem de jatos em forma de cone é consequência da influência do campo eletrostático e, caso este seja relevante, também do campo gravítico. A sua formação depende da relação existente entre a tensão superficial e as forças inerciais. Esta relação é conhecida pelo número de Weber. O aumento deste número significa uma maior quantidade de quebras no jato, com formação de gotas mais pequenas. A formação destas gotas é conhecida por *atomização eletrohidrodinâmica* (EHDA).
O estudo deste fenómeno físico tem vindo a ser abordado de forma analítica (e semianalítica) e também experimentalmente [13], contudo apenas na última década é que têm vindo a ser desenvolvidos códigos numéricos capazes de resolver este tipo de escoamento. Uma das aplicações dos cones de Taylor é na área da impressão de alta resolução, sem contacto direto, [14, 15]. Estas formas de impressão, que usam jatos eletrohidrodinâmicos, são conhecidas como *e-Jet*. Também a utilização de polímeros em microfabricação tem vindo a ser investigada neste domínio [16]. O impacto nesta área é especialmente vantajoso, pois o tamanho das gotas formadas pode ser muito mais pequeno que o tamanho do bocal, de tal forma que se o bocal for da mili/microescala as gotas podem chegar

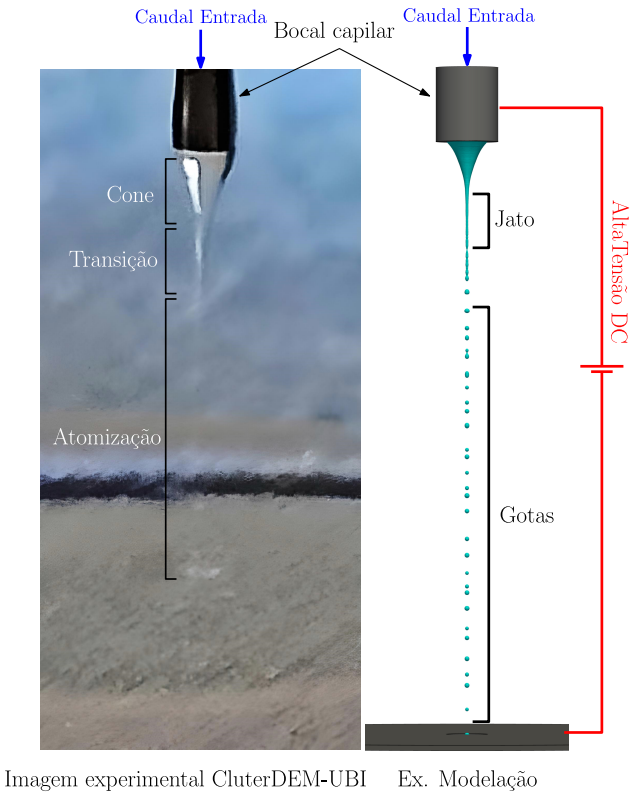


Figura 1.1: Cone de Taylor. Fotografia com indicação dos diferentes regimes por que passa o escoamento. Esquema da operação do cone de Taylor em modo estável.

à ordem de grandeza da escala nano. E é precisamente a capacidade de obter jatos a tão pequena escala que proporciona a alta resolução na impressão por e-Jet.

A área da biotecnologia é outra área de aplicação, por exemplo, no desenvolvimento de eletrosprays para o encapsulamento de sistemas bioativos [17], onde os princípios dos jatos eletrohidrodinâmicos são aplicados para produzir cápsulas fibrosas que transportam, por exemplo, algum tipo de medicamento. Isto é feito através da utilização de jatos coaxiais em associação ao cone de Taylor.

Estes jatos coaxais também podem ser utilizados apenas para estabilizar o jato, que por vezes é muito imprevisível no regime de alta tensão elétrica [18]. Isto é feito através da aplicação de um escoamento coaxial com o cone.

Com o início da exploração espacial, e a procura por sistemas de propulsão inovadores também a investigação deste fenómeno foi aplicada à propulsão, denominada neste caso por propulsão coloidal, a qual tem vindo a desenvolver-se de forma positiva [19].

Como vemos este fenómeno tem aplicações em áreas transversais que são desde a manufatura à biotecnologia e passando pela aeroespacial. Isto significa que existe uma necessidade de desenvolver códigos numéricos com boa precisão e capazes de aferir de forma paramétrica o funcionamento e desempenho destes sistemas, sem a necessidade de estar sempre a efetuar dispendiosos ensaios experimentais.

1.1.1 Modos de funcionamento de jatos de cone de Taylor

Os jatos eletrohidrodinâmicos (EHD) do tipo cone de Taylor são uma manifestação fascinante da interação entre as forças eletrostáticas e as tensões superficiais em fluidos condutores. Este fenómeno tem sido objeto de extensa pesquisa devido às suas potenciais aplicações em áreas como impressão a jato de tinta, produção de nanofibras e a entrega de medicamentos. Os diversos modos de funcionamento dos jatos EHD, sob diferentes condições experimentais, são descritos abaixo, e podem ser observados na Figura 1.2.

- *Dripping*:

  Uma gota cresce na extremidade do capilar até que a gravidade a faça cair. Este modo é evidente na imagem inferior central. Neste modo, o líquido pendura da agulha ou capilar, formando uma gota pendente que eventualmente se desprende devido à gravidade. A gota cresce até um certo tamanho, após o qual a tensão superficial não consegue mais sustentar a gota, levando-a a cair. A imagem mostra claramente este momento de ”quebra” com a legenda ”Quebra em Dripping”.

- *Microdripping*:

  Pequenas gotas são periodicamente emitidas do ápice do cone devido aos efeitos significativos das forças eletrostáticas. Aqui a contribuição da força eletrostática é ainda pequena e a formação do cone de Taylor é periódica;

- Jato Estável com Cone de Taylor:

  Forma-se um cone na extremidade do capilar de onde é emitido um jato contínuo e estável. Na imagem superior direita observamos um jato contínuo que sai da ponta da agulha. Antes da emissão do jato o líquido forma um ”cone de Taylor” na ponta da agulha, um formato cónico característico é formado quando o líquido é submetido a um campo elétrico relativamente forte. O jato é emitido da ponta afiada do cone, e é contínuo e estável.

- *Spinning*:

  Este modo não foi possível de visualizar no nosso laboratório, mas sabe-se que a solução é ejetada tangencialmente à superfície do cone através de ondas periódicas. Este modo é usual quando são usadas soluções relativamente viscosas ou polímeros.

- Multi-jato:

  Este modo não é claramente visível na imagem obtida na UBI, mas geralmente envolve a emissão de múltiplos jatos finos a partir de uma superfície líquida ou a formação de vários cones de Taylor (como se vê na janela de zoom). Em determinadas condições, a superfície do líquido torna-se tornar instável e leva à formação de múltiplos jatos.

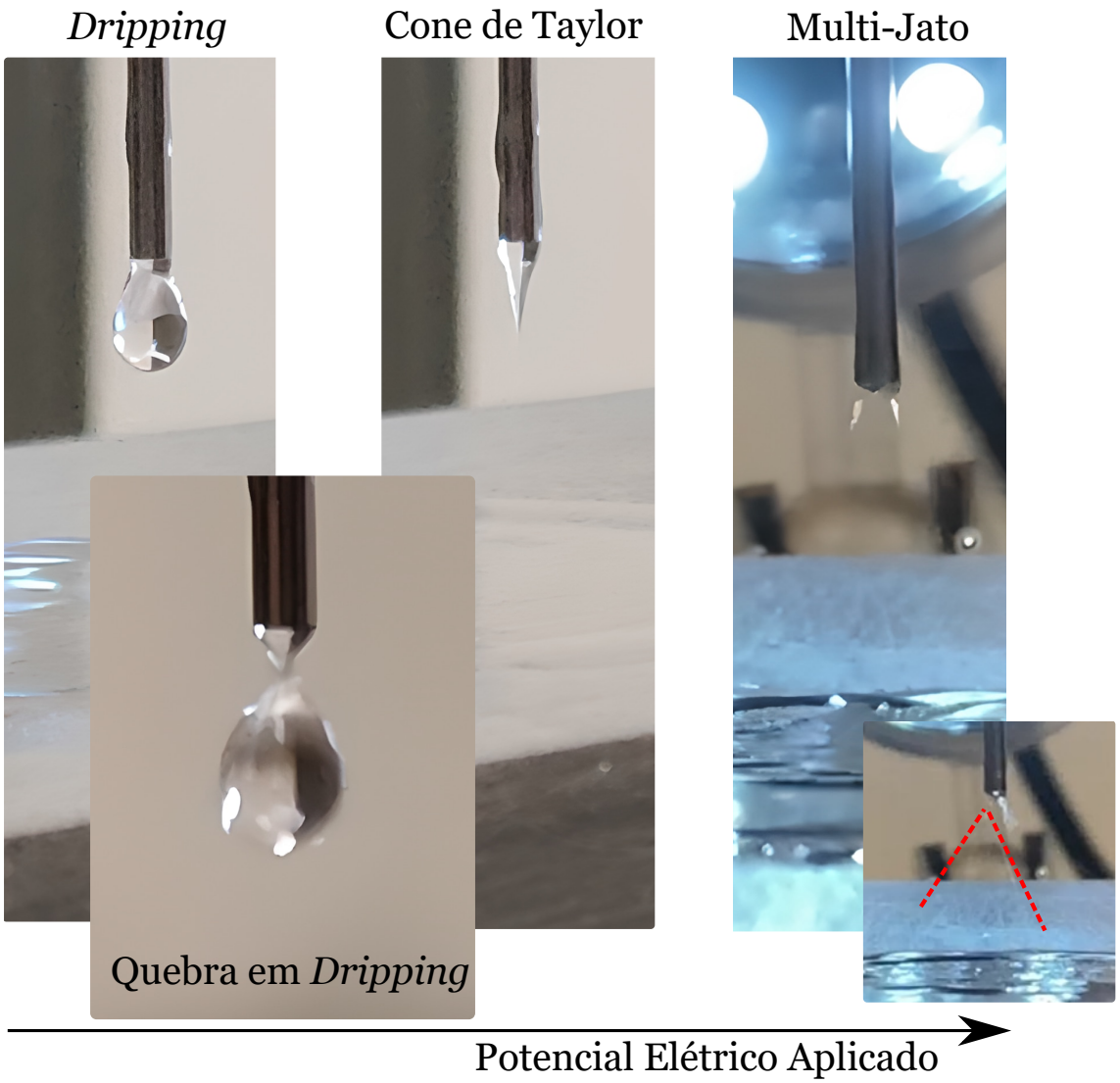


Figura 1.2: Visualização experimental de três diferentes modos de funcionamento do jato EHD, Dripping, Cone-Jato e Multi-Jato. Estes modos estão ordenados segundo o potencial elétrico aplicado no bocal. Na fotografia mais à direita temos a formação de dois jatos no bocal e um deles abre-se outros jatos finos, esta abertura é delimitada pelas linhas a vermelho.

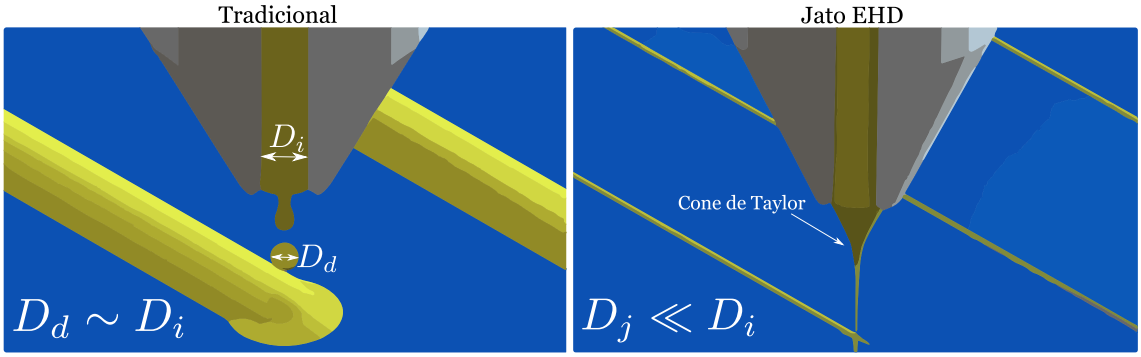


Figura 1.3: Ilustração da comparação entre a tradicional *dripping* de gotas e jatos EHD com cone de Taylor. Imagem adaptada de [1].

1.1.2 Impacto Socioeconómico dos Jatos Eletrohidrodinâmicos

A investigação e desenvolvimento de jatos eletrohidrodinâmicos (EHD) baseados em cone de Taylor representa um campo inovador de estudo que possui uma ampla gama de implicações sociais e económicas. Estes sistemas, que aproveitam os princípios da eletrohidrodinâmica para gerar jatos de fluido altamente controlado, têm o potencial de transformar várias indústrias e múltiplos campos de aplicação. Nesta secção exploraremos a importância e o impacto sociocultural, económico e ambiental destes jatos.

- Avanços em Processos de Fabricação [15, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27]

  Os jatos EHD têm mostrado aplicações promissoras em fabricação avançada, permitindo a produção precisa e escalável de materiais, como fibras, filmes finos e partículas micro/nanométricas. Isso pode revolucionar indústrias como a da eletrónica, têxteis e a de dispositivos médicos, permitindo otimizar o rendimento dos processos de produção e reduz o desperdício de recursos. A impressão eletrohidrodinâmica proporciona uma resolução muito mais elevada do que as técnicas de impressão normais, como a impressão a jato de tinta. Enquanto na forma tradicional a ordem do diâmetro ejetado é da mesma grandeza que o bocal utilizando, nos jatos EHD este é muito inferior. Esta capacidade de resolução atinge diâmetros típicos entre ~ 100 nm e vários µm [21].

  A Figura 1.3, mostra a comparação entre o método tradicional de impressão, onde a extração do líquido é feita apenas através da transferência de quantidade de movimento dentro do bocal, e a tecnologia de jatos EHD, onde a aplicação de um campo elétrico forma jatos muito finos, levando a um aumento extraordinário na capacidade de deposição em alta resolução.

  No contexto da geração de energia [28] e em tecnologias ambientais, os jatos EHD têm potencial para melhorar o rendimento dos sistemas de captura de poluentes, como aerossóis e partículas de poluição, contribuindo para a qualidade do ar e para a mitigação das mudanças climáticas.

- Impacto na Saúde e Medicina [29, 30, 31, 32, 33, 34, 3]

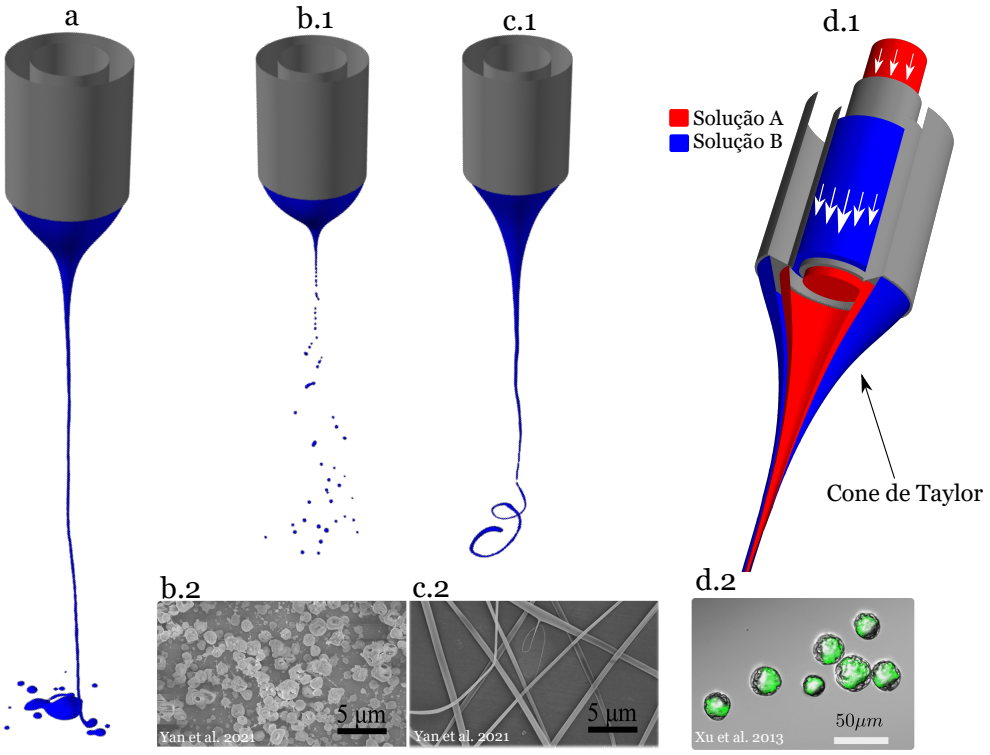


Figura 1.4: (a) Modo estável de deposição contínua (b.1) Formação de eletrosprays levando a uma deposição do tipo (b.2). (c.1) Formação de *electrospinning* levando a uma deposição de tipo (c.2), (d.1) Ilustração do funcionamento de jatos coaxais para deposições de microesferas do tipo (d.2) onde as zonas verdes são a solução ativa A encapsulada pela solução B (fonte de (b.2 e c.2) [2] e de (d.2) [3]).

Os jatos EHD têm uma forte presença na saúde e medicina, como exemplo na administração de medicamentos, bioimpressão e engenharia de tecidos. A capacidade de controlar a libertação de medicamentos por meio de jatos EHD pode melhorar a eficácia dos tratamentos médicos, garantindo doses precisas e direcionadas aos pacientes. Isso pode resultar em tratamentos mais eficazes e reduzir os efeitos colaterais. Isto é usualmente feito através da utilização de bocais coaxais onde um líquido que se pretende encapsular é injetado na abertura exterior e no interior é introduzido o medicamento.

Os jatos EHD também têm aplicações na bioimpressão e engenharia de tecidos, como referido, permitindo a criação de estruturas complexas de tecidos humanos. Isto tem o potencial para revolucionar a medicina regenerativa e introduzir novas visões em biomédica. Veja-se a Figura 1.4 sobre os diferentes modos de funcionamento e utilização na fabricação de estruturas.

- Impacto Socioeconómico:

  A implementação de tecnologias EHD pode levar a uma redução significativa de custos operacionais em várias indústrias, principalmente na área emergente de impressão 3D, além de promover a eficiência energética. Consequentemente resulta em economias substanciais para empresas e consumidores. O tamanho do mercado global de impressão 3D foi avaliado em 16,75 mil milhões de dólares em 2022 e prevê-se que cresça a uma taxa de crescimento anual composta (CAGR) de 23,3%

de 2023 a 2030, segundo o relatório de mercado [35].

1.2 Estado da Arte

O estudo de jatos eletrohidrodinâmicos já existe há algum tempo, com os primeiros estudos introduzidos em 1964 feitos por Taylor [36], contudo devido a ser um fenómeno extremamente complexo, a compreensão ainda não está totalmente madura. Este tipo de escoamentos tem a complexidade da dinâmica de escoamentos bifásicos, e da sua interação, e ainda incorpora efeitos eletromagnéticos. Para a melhor compreensão e otimização destes jatos são necessários mais estudos sobre os diferentes tipos de parâmetros e condições de fronteira. Para este efeito são necessárias abordagens experimentais e numéricas, devendo ser sempre usadas em sinergia. Nesta secção são apresentadas as diferentes abordagens existentes até ao momento para que possa justificar a linha de investigação desta tese.

1.2.1 Visão geral sobre trabalhos experimentais

Para podermos saber o estado da arte da atomização de jatos eletrohidrodinamicos, e podermos planear que abordagens específicas tomar no trabalho desta tese, de forma a contribuir significativamente para novos usos, propondo modelos e obtendo resultados significativos para a ciência e engenharia, é primeiramente feita uma revisão da literatura relativamente aos diferentes estudos experimentais e numéricos neste tema. Ainda que esta tese seja sobre modelação numérica, os estudos experimentais são fundamentais para podermos validar a implementação das equações de governo do escoamento e dos métodos numéricos desenvolvidos.
Da literatura focamo-nos em sete estudos que proporcionam as condições ideais para replicar a realidade e também para comparar o desempenho de métodos numéricos. Estas "condições ideais" significam que estes estudos experimentais proporcionam os dados e resultados mensuráveis para a validação do modelo numérico a desenvolver. Estes estudos estão focados em três questões principais:

1. Quais as propriedades geométricas e a sua influência?
2. Quais as propriedades do fluidos utilizados?
3. Que condições fronteira e iniciais são dadas e que variáveis são medidas para resultados?

Primeiramente, e em relação às propriedades geométricas, nesta tese o foco principal é os jatos EHD de líquido único e par único de bocal/coletor. Isto porque estamos focados em analisar em detalhe os processos de atomização de um jato único líquido em EHD, o que de *per si* já é complexo. Consideremos então a geometria da Figura 1.5 e a Tabela 1.1 que mostra a composição geométrica para a formação de jatos EHD singulares. O bocal capilar de entrada do líquido é um cilindro com um diâmetro interno D_i e um exterior

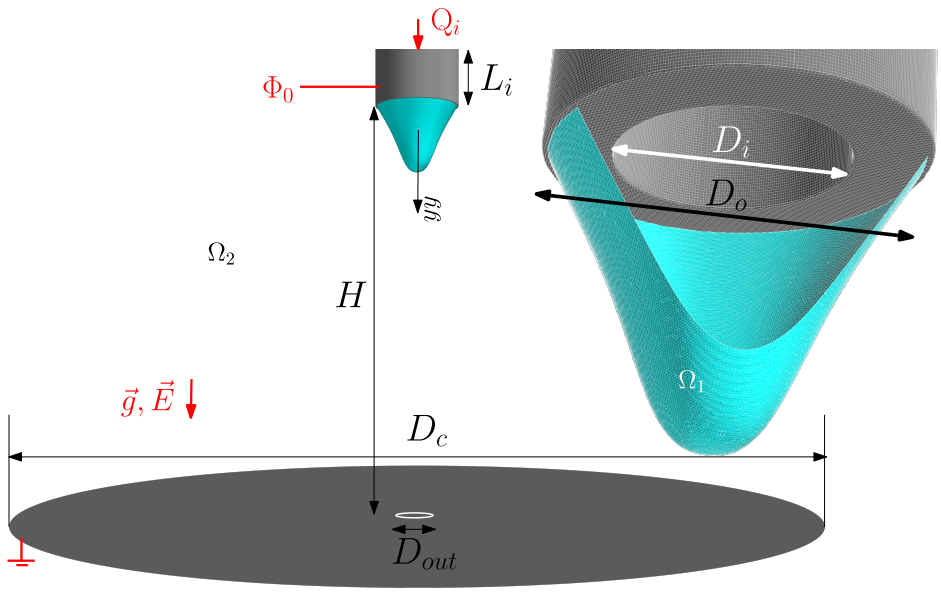


Figura 1.5: Geometria base para os casos de teste de jatos líquidos eletrohidrodinâmicos, contendo: Um bocal capilar, definido para um diâmetro interno e externo, que está distanciado de um prato coletor.

D_o. Ainda que em muitos estudos experimentais seja dada relevância apenas ao diâmetro externo, numericamente é necessário muito cuidado e exatidão no diâmetro interno. Isto porque, o líquido, sendo de dimensões capilares, irá muitas vezes aderir à parede no bocal molhado [37, 22] com um certo ângulo de contacto.

Para cada caso de teste da Figura 1.1 as condições de funcionamento e os resultados para possível comparação com o nosso modelo numérico foram levantados e sumariados na Tabela 1.2. As comparações em que estamos interessados são a velocidade do escoamento, principalmente, e a relação da velocidade das gotas emitidas com o potencial elétrico e caudal aplicados no bocal, bem como o diâmetro das gotas emitidas. Um dos casos de teste mais importantes usado nesta tese é o Cal97 [7], porque este é o estudo mais fundamental da transição cone-jato, incluindo a relação entre o diâmetro das gotas e a corrente elétrica gerada, para diferentes potenciais elétricos e caudais de entrada. Repare-se que a zona de maior complexidade dos jatos EHD reside na quebra do jato em gotas, pois é nesta zona de transição que a complexidade da interação entre todas as diferentes forças hidrodinâmicas e eletrostáticas é elevada, nas outras regiões o escoamento é regido maioritariamente só por uma delas.

Na Tabela 1.2, existe também a referência do líquido utilizado para formar o jato. Um sumário dos diferentes fluidos utilizados na literatura é feito na Tabela 1.3. Note-se que a condutividade elétrica é um parâmetro muito estudado em termos da sua influência sobre a variação na formação e estabilidade do jato contudo, e analisando os resultados, a condutividade normalmente modifica a resposta elétrica do jato, isto significa, geralmente, que muda o tempo de emissão do jato. Por outro lado a viscosidade é uma propriedade muito importante, e é por isso que a Tabela 1.3 está ordenada em função da viscosidade dos fluidos, em que a linha horizontal (entre o (13) e (14)) separa os fluidos altamente viscosos e dos menos viscosos. Esta organização justifica-se pelo facto de a viscosidade ter

Tabela 1.1: Condições geométricas para diferentes casos de teste disponíveis na literatura. Todas as dimensões estão em mm.

Designação na Tese	D_i	D_o	D_{out}	L_i	H	Tipo de Coletor	Ano [Ref.]
Tan94	0.12	0.45	N/A	N/D	30.0	N/D	1994 [9]
Cal97	0.70	1.00	N/D	1[b]	10.0	N/D	1997 [7]
Kum13[a]	0.12	0.45	N/A	270	30.0	○$D_c = 300$	2013 [38]
Ism18	0.15[b]	0.25	2.00	N/D	3.0	N/D	2018 [39]
Xia19	0.018[b]	0.03	2.00	N/D	3.0	N/D	2019 [40]
WangA	0.21	0.40	N/A	10	20	○$D_c = 150$	2020 [41]
WangB	0.33	0.63	N/A	10	20	○$D_c = 150$	2021 [42]

[a] Estudo numérico das condições do caso Tang94 , [b] Muitos estudos experimentais apenas medem o diâmetro externo devido às reduzidas dimensões, estes estudos não mencionam o diâmetro interno do bocal, mas é geralmente assumida uma espessura de 0.3% do D_o.

Tabela 1.2: Condições de funcionamento de diferentes casos de teste da literatura.

Designação	Φ_0/kV	$Q_i/\mathrm{nL\,s^{-1}}$	$U_i/\mathrm{mm\,s^{-1}}$	Medição [b]	$Liq.$
Tan94	5	2778	245.630	u_m, u_d, d_d	(31)
Kum13[a]	5	2778	245.630	u_m, u_d, d_d	(31)
Cal97	4	$[2900, 5100]$	$[7.5, 13.3]$	d_d, i_e	(31)
Ism18	2.5	$[17, 1700]$	$[0.962, 96.200]$	L_j	(3) (23/a) (9/a) (9/b)
Xia19	$[1.4, 1.9]$	$[40, 66]$	$[0.15, 0.259]$	Q_i	(19/c)
Wang (a)	$[3.5, 5.9]$	$[40, 200]$	$[1.155, 5.774]$	L_j, L_T, θ_T, d_d	(6)(25)
Wang (b)		$[400, 900]$	$[11.549, 25.985]$		(6)
Wang (c)		$[400, 900]$	$[4.677, 10.523]$		(6)
Wang(b/whip)	6.0	1000 4000	28.872 115.487	Snapshot	(6)
Wang(c/whip)	6.9	2000 4000	23.384 46.767	Snapshot	(6)

[a] Estudo numérico de Tang(1994), [b] u_m, u_d, d_d são a velocidade axial do meio (sendo este ar), a velocidade axial das gotas e o diâmetro das gotas, respetivamente.

um papel importante na formação dos jatos EHD, de tal forma que o aumento da viscosidade provoca:

- Redução da velocidade do jato;
- Aumento do diâmetro das gotas emitidas, que leva à formação de gotas satélite;
- Que devido ao aumento das forças viscosas, as instabilidades diminuem, e tal induz uma diminuição na formação de plumas de gotas e torna os jatos mais axissimétricos.

1.2.2 Abordagens computacionais

Modelar escoamentos bifásicos com campos elétricos é uma tarefa complexa que envolve a interação entre as equações de Navier-Stokes para a parte fluida e as equações de Maxwell para o campo elétrico aplicado.
Nesta secção será feita uma revisão bibliográfica da modelação numérica já existente para jatos eletrohidrodinâmicos, de forma a serem aferidas as respetivas qualidades, fragilidades e possibilidades de melhoria nos modelos que foram desenvolvidos até ao momento exato deste trabalho. Como visto, o escoamento em estudo é considerado um escoamento de duas fases imiscíveis, e para este tipo de escoamento existem duas hipóteses fundamentais a considerar, sendo estas,

- **A hipótese do meio contínuo:**

  O sistema de escoamento bifásico aqui considerado consiste num *continuum*, onde as propriedades do escoamento e do material são funções espacio-temporais bem definidas que caracterizam a fase e o seu escoamento. Esta hipótese trata dos fluidos como meios contínuos, o que significa que as propriedades do fluido, como a densidade e velocidade, são definidas em todos os pontos do espaço. Tal sugere que a interface tem uma espessura que lhe está associada.

  1. Método Ghost Fluid (GFM): As variáveis são estendidas para fora da região física real, utilizando células fantasma que auxiliam o cálculo e a captura da descontinuidade na interface;
  2. Volume of Fluid (VoF) [46, 47, 48]: A interface é representada por uma variável de fração de volume que varia entre 0 e 1.
  3. Level Set (LS) [49]: O método Level Set utiliza uma função de distância atribuída para representar a interface, mas ainda trata os fluidos como contínuos.
  4. Front Tracking [50]: A interface é representada por uma malha móvel que é rastreada e atualizada ao longo do tempo. A interface é representada por um plano bidimensional adicional que se sobrepõe a uma malha de cálculo tridimensional fixa.
  5. Phase Field Method [51]: A interface é representada por uma variável contínua (o campo de fase) que varia gradualmente de uma fase para outra.

Tabela 1.3: $\rho\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$, μ mPa s, $\gamma\,\mathrm{mN\,m^{-1}}$, σ_e µS $\mathrm{m^{-1}}$ and ε. O subscrito i refere-se ao líquido liq_i.

(i) Nome do fluido	ρ	μ	γ	σ_e	ε_r	Ref.
(1) Glicerol	1262	1396	63.0	$0.01, 1.0, 6, 14$	42.3	[40]
(2) Glicerol	1262	976	56.6	0.33	–	[39]
(3) 10% H_2O 90% Glicerol	1225	180	57.0	4.8	–	[39]
(4) Trietilenoglicol	1123	49	45.3	$5.5, 9, 25$	23.7	[40]
(5) Trietilenoglicol	1124	49	40.0	0.32	–	[39]
(6) Dietilenoglicol	1118	39	44.8	24	6.66	[41, 42]
(7) Etilenoglicol	1110	21	48.4	$0.35, 10, 108, 490$	21.0	[40]
(8) Etilenoglicol+ LiCl	1109	20	47.7	21	38.8	[43]
(9) Etilenoglicol	1106	19	19.3	$0.78, 4.0, 10.0$	–	[39]
(10) Dipropilenoglicol	1023	75	35.5	2.0	–	[39]
(11) n-Decanol	828	11.8	28.0	0.94	7.6	[44]
(12) 1-Octanol	826	10.6	26.1	$0.64, 8$	10.3	[40]
(13) 1-Octanol	827	7.2	23.5	2.6	10.0	[44]
(14) iso-Butanol	802	4.703	23.0	13	18.5	[43]
(15) iso-Butanol + LiCl	802	4.703	23.0	30	18.5	[43]
(16) n-Butanol	810	2.948	24.6	15	17.8	[43]
(17) n-Butanol + LiCl	810	2.948	24.6	29	17.8	[43]
(18) 1-Butanol	800	2.504	23.0	6.0	–	[45]
(19) Carbonato de propileno	1207	2.8	45.2	$0.25, 1, 10, 55, 102$	63.0	[40]
(20) Carbonato de propileno	1200	2.5	40.9	10	–	[39]
(21) Propilenoglicol	919	1.9	27.7	$5, 9.3$	12.3	[40]
(22) Propilenoglicol	916	1.8	27.7	0.2	–	[39]
(23) 1-Propanol	803	1.9	24.0	9.0	20.3	[45]
(23) Propanol	782	2.4	19.6	0.11, 2.1	–	[39]
(25) Etanol	791	1.6	22.6	51.0	24.0	[41]
(26) Etanol	789	1.2	24.0	7.0	24.3	[45]
(27) Etanol	790	1.2	22.3	$0.76, 5, 10, 14, 24, 50$	24.8	[40]
(28) Etanol	787	1.0	22.0	10	–	[39]
(29) Metanol	795	0.590	21.0	7.0	32.7	[45]
(30) 2-Butanone	805	0.417	24.6	45	18.5	[43]
(31) Heptano	685	0.390	21.0	4.5	1.9	[9, 7]

6. Lattice Boltzmann Method (LBM) [52, 53, 54, 55]: Baseia-se na mecânica estatística para simular o escoamento, utilizando uma malha de lattice para representar o espaço e calcula as colisões e propagações de partículas fictícias. Para geometrias complexas tem um custo computacional muito elevado.
7. Método de Elementos Finitos (FEM) [56]: Resolve equações diferenciais de governo subdividindo o domínio em elementos finitos.
8. Método Espectral [57, 58]: Expansão da solução em termos de funções base (como funções seno e cosseno) em vez de valores pontuais. Comummente usado em simulações de escoamentos turbulentos e/ou ondulatórios.

- **A hipótese da interface discreta:**

  Esta abordagem trata a interface entre as fases de uma maneira mais discreta ou pontual. A interface que separa as duas fases pode ser aproximada como uma superfície matemática de descontinuidade. A interface bidimensional é considerada de espessura nula e não tendo massa.

  1. Boundary Element Method (BEM): Este método é frequentemente usado quando a interface é extremamente bem definida, sendo esta tratada como superfície de fronteira e calculada de forma explícita.
  2. Lagrangian Particle Tracking [38, 59, 60, 61]: No LPT, as fases são modeladas como um conjunto de partículas discretas que são individualmente tratadas através do campo de velocidade. Em aplicações típicas de LPT, uma fase (frequentemente o fluido) é tratada como um meio contínuo, enquanto a outra fase (como gotas, bolhas ou partículas sólidas) é tratada na forma de entidades discretas que são rastreadas num campo de escoamento contínuo.
  3. Particle-in-Cell (PIC) and Marker-and-Cell (MAC) [62]: Estes são métodos que combinam aspetos de métodos baseados em malhas e em partículas para rastrear as interfaces de forma discreta.
  4. Simulações de Monte Carlo: [63] Utilizado para o cálculo estocástico de partículas ou gotas. Utilizado métodos estatísticos e estrategicamente aplicado em dinâmica molecular [64, 54].
  5. Smooth Particle Hydrodynamics (SPH) [65]: Este é um método completamente livre de malha computacional. No SPH, as soluções numéricas aproximadas das equações de governo são obtidas a partir de um conjunto de partículas, que atuam como pontos materiais e pontos de interpolação, e que interagem entre si através de uma função de peso.

Como vemos, existem diferentes possibilidades, contudo, e após ao analisar as vantagens e desvantagens de cada uma, acabámos por focar-nos nos métodos de FVM e principalmente nos modelos que utilizam o método *Volume of Fluid* (VoF), pois este método proporciona uma solução com a completa integração de todas as equações de governo do sistema de duas fases imiscível e eletrodinâmico. Aqui apresentamos alguns estudos neste campo e que utilizam maioritariamente esta abordagem numérica:

- Foi desenvolvido um modelo numérico para o escoamento no menisco de um líquido dielétrico, o qual é provocado pela ação de um campo eletrostático, neste caso utilizando um processo iterativo que resolve a equação da continuidade, da quantidade de movimento e do potencial elétrico. O modelo geométrico adotado pelos autores foi do tipo bidimensional e axissimétrico. Verificando-se que o cálculo do potencial elétrico é a equação mais demorada a convergir, necessitando de muitas iterações, o que corresponde a uma fragilidade deste modelo [66].

- Foi simulada numericamente a formação do jato-cone com heptano e etanol, considerando uma atomização estacionária. Neste caso foi utilizado o código comercial de CFD, ANSYS CFX, e para a resolução da equação do campo elétrico foi criada uma *User Defined Function* (UDF). Esta UDF adaptou uma equação do tipo de transferência de calor para funcionar como solução da parte elétrica, permitindo calcular assim as forças elétricas no corpo e incluindo-as nas equações de Navier-Stokes. Isso permitiu acoplar as forças eletrostáticas com as hidrodinâmicas. Uma das simplificações adotadas foi desprezar a corrente elétrica que ocorre no sistema. O modelo adotado para representar as diferentes fases calcula as projeções na interface entre o líquido e o gás usando um modelo *Volume of Fluid* (VoF). Os resultados obtidos mostraram-se consistentes com os resultados experimentais [67].

- Um outro modelo foi também desenvolvido para simular a quebra do jato formado pelo cone de Taylor, utilizando o fluido diclorometano,este é um fluido de condutividade e permissividade elétrica baixa, que é frequentemente escolhido para facilitar a não consideração de corrente elétrica no escoamento. O desenvolvimento de métodos numéricos, abrangendo tanto os de *elementos finitos* como os de *volumes finitos*, para estudar a formação dos jatos em cones de Taylor, tem progredido meticulosamente e de forma sistemática. A maioria destes estudos baseia-se em modelos *Volume of Fluid* (VOF). Uma das simplificações frequentemente adotadas considera apenas a distribuição das cargas elétricas na interface do volume do fluido [68].

- Um outro código que foi desenvolvido no OpenFoam, neste caso para simular a deformação do jato formado no cone de Taylor e a sua subsequente quebra em gotas, utilizando como fluido o heptano, um líquido de baixa condutividade [69]. A investigação revelou que o diâmetro das gotas e a corrente elétrica são dependentes da tensão aplicada. Conforme a tensão aumenta, o comprimento do cone e o diâmetro do jato diminuem, em concordância com observações experimentais. No entanto, notou-se que o comprimento do jato aumenta com a tensão aplicada, o que diverge dos dados experimentais.

- No estudo conduzido por [70], o código comercial ANSYS FLUENT foi utilizado. A investigação contemplou o campo de velocidades, a pressão e as características elétricas. No entanto, não foi implementada neste modelo a possibilidade de quebra do fio de escoamento em gotas gerada pelas tensões superficiais.

- No trabalho de [71], foi desenvolvido um modelo numérico para estimar a forma do

escoamento produzido por um cone de Taylor sob a influência de um campo elétrico externo. Neste caso foi utilizado o modelo VOF e uma geometria axissimétrica, contudo, este modelo apresenta limitações para caudais elevados, típicos em aplicações industriais de sprays.

- No estudo conduzido por [72], uma "agulha" de fibra de carbono foi adicionada ao tubo convencional de Taylor, e colocada no centro do tubo capilar com o objetivo de estabilizar o jato. Os autores realizaram os cálculos utilizando o software FLOW3D. A ionização do eletrospray foi calculada com base no modelo de dielétrico com vazamento de Taylor-Melcher, enquanto a interação entre o líquido e o gás foi representada pelo modelo VOF. Embora tenham obtido alguns resultados, estes foram apenas para casos sem quebra do jato. Ainda assim algumas das métricas obtidas neste estudo foram atribuídos à capacidade de integrar o caudal com a corrente elétrica.

- No trabalho de [73] foi implementado o modelo de dielétrico com vazamento de Taylor-Melcher em conjunto com o modelo Volume of Fluid (VoF). Dado que o escoamento em análise é multifásico, o VOF foi utilizado para calcular a interface contínua das gotas com o fluido, conforme destacado também por [74].

- No estudo conduzido por [48] recorreu-se ao OpenFoam para desenvolver um modelo físico-matemático. Este modelo abordou a complexidade relacionada com as diferenças de escalas, tais como a comparação entre o tamanho do bocal e o comprimento do jato, assim como o diâmetro das gotas formadas. Para mitigar estas dificuldades é comum utilizar bocais de tubos finos e líquidos de baixa condutividade, os quais resultam na formação de jatos de maior diâmetro.

- No trabalho de [75] foi utilizado o software FLOW-3D para simular integralmente o processo de formação de gotas, ao qual é associado o modelo de dielétrico com vazamento de Taylor-Melcher, conforme descrito também por [76]. Este estudo abrangeu a formação do cone de Taylor, o início da emissão do jato e a subsequente fragmentação do jato em gotas.

1.3 Objetivos do trabalho

Através da revisão bibliográfica é possível aferir que não existem códigos comerciais prontos a utilizar para modelar escoamentos deste tipo. Os existentes tendem a simplificar alguns termos que podem ter um peso significativo na precisão dos resultados numéricos, em comparação aos ensaios experimentais. Assim, e de forma a conseguir desenvolver uma ferramenta computacional para modelar o escoamento de jatos eletrohidrodinâmicos, necessitamos de desenvolver investigação tanto em termos de dinâmica de fluidos como da implementação numérica da influência da aplicação de campos eletrostáticos neste tipo de escoamento. Com isto, os objetivos deste trabalho podem ser descritos na

forma de um e vários objetivos específicos.

Objetivo Principal
Desenvolver, analisar e otimizar um modelo numérico para jatos EHD, utilizando OpenFOAM, complementado por técnicas avançadas de análise e otimização do seu desempenho.

Objetivos Específicos

1. **Estudo de base de Jatos EHD**
    - Investigar o princípio do Cone de Taylor e as forças que nele atuam, desde forças de capilaridade até forças eletrostáticas.
    - Compreender e modelar as instabilidades fundamentais associadas aos jatos EHD, incluindo as instabilidades de Rayleigh-Plateau e as instabilidades de ondulação.
    - Analisar a influência das condições de fronteira de entrada.
2. **Desenvolvimento e Implementação de Modelos Numéricos**
    - Desenvolver equações de governo adequadas para a simulação numérica, englobando conservação de massa, quantidade de movimento, tensão superficial e equações de Maxwell.
    - Implementar um modelo para a conservação e transporte da densidade de carga elétrica.
    - Considerar fenómenos transientes relevantes para a evolução da dinâmica do jato EHD.
3. **Validação e Teste do Modelo**
    - Validar o modelo numérico proposto com dados experimentais disponíveis na literatura.
    - Realizar simulações em diferentes regimes operacionais para testar a robustez e precisão do modelo.
4. **Métodos Avançados para Análise e Otimização**
    - Implementar e validar técnicas de decomposição modal para analisar padrões e modos dominantes na dinâmica dos jatos EHD.
    - Utilizar Redes Neuronais Artificiais (ANN) e Redes Neuronais Convolucionais (CNN) para prever comportamentos complexos e de características não-lineares nos jatos.
    - Integrar abordagens de aprendizagem de máquina para otimizar parâmetros e condições de operação do jato, visando aprimorar o seu desempenho e a qualidade da atomização.

5. **Aplicações do Modelo**

    - Investigar o processo de eletrospray como uma especialização da atomização de jatos EHD.
    - Avaliar o impacto de diferentes parâmetros na dinâmica do jato (nomeadamente, tensão de alimentação, propriedades do fluido).
    - Propor otimizações melhorar o rendimento/desempenho e/ou a qualidade da atomização, com base nos resultados das simulações.

Objetivos Secundários

- Contribuir para o desenvolvimento da literatura nesta área com um modelo geral e devidamente validado para jatos EHD, facilitando futuros estudos e aplicações industriais.
- Estruturar a partilha de informações de modo a facilitar o uso do modelo, desenvolvido por outros investigadores ou na indústria.

1.4 Visão geral da organização da tese

Após serem apresentados os objetivos e contribuições do presente trabalho, passa-se agora à descrição de como o trabalho se encontra estruturado na presente tese.

Capítulo 2: O segundo capítulo apresenta os fundamentos sobre jatos eletrohidrodinamicos, os quais são regidos por equações de governo da magnetohidrodinâmica. Contudo o nosso foco é em jatos formados por ação de corrente direta, isto significa que as equações de governo da magnetohidrodinâmica podem ser simplificados dando forma, à normalmente denominada, eletrohidrodinâmica. Estas simplificações são absolutamente necessárias pois mais equações e termos significam maior tempo computacional.

Capítulo 3: Após serem apresentadas as equações de governo, o terceiro capítulo discute a abordagem numérica para a sua discretização e a forma de implementação de metodologias numéricas utilizadas para o cálculo do escoamento. São apresentados todas as diferentes componentes e as propostas de melhoria do modelo feitos ao longo desta investigação.

Capítulo 4: Neste capítulo mostramos os resultados obtidos no estudo do desempenho dos jatos. Este capítulo é dividido em três partes, inicialmente o trabalho se foca nos jatos axissimetricos, onde estudamos apenas o desempenho da formação do cone de Taylor, a emissão do jato e a quebra e emissão de gotas. Posteriormente é desenvolvido, um modelo tridimensional de forma a obter pela primeira vez a modelação computacional do efeito de whipping. Finalmente, estudamos a transição do whipping do jato para a formação de plumas. Estes resultados são sempre comparados com a literatura, tendo por base a

validação do modelo e depois o estudo da sua operação em diferentes condições. Este capítulo tem um carácter de estudo da dinâmica de fluidos enquanto o próximo tem um carácter de aplicação em engenharia.

Capítulo 5: Neste capítulo usamos os modelos anteriormente validados e criamos hipóteses para novas aplicações. A primeira aplicação é na engenharia aeroespacial com o estudo de uma extração de grelha dupla para utilização em micro-propulsores coloidais. A segunda aplicação da modelação destes jatos EHD é a criação de modelos gémeos digitais (*Digital Twins*), e nesta linha de investigação propomos neste capitulo a utilização de alguns métodos avançados que são utilizados para a análise e otimização deste tipo de escoamentos nessas condições.

Capítulo 7: No capítulo final são apresentadas as conclusões do trabalho e as linhas de orientação para trabalhos futuros.Aqui estão expostas as conclusões do trabalho e as linhas de orientação para trabalhos futuros, nomeadamente, a formação de jatos EHD sem a necessidade de ter microbocais, sendo que o possível objetivo de aplicações será na área da microfabricação.

Discloser

Algumas ideias, resultados e figuras apresentadas nesta tese foram incluídas ou submetidas nas publicações listadas no Apêndice A, assim contribuindo para o estado da arte do estudo da atomização de jatos eletrohidrodinâmicos e também, sobre as técnicas avançadas de estudo de escoamentos com multifísica.

Capítulo 2

Fundamentos de Jatos Eletrohidrodinâmicos

Este capítulo apresenta:

- A descrição multifísica das forças que estão em jogo na formação de jatos EHD;
- As forças a atuar nas instabilidades;
- As equações de Governo do escoamento bifásico Eletrohidrodinâmico;
- As simplificações da Magnetohidrodinâmica e Formulação da Eletrohidrodinamica;
- Os grupos adimensionais e tempos de relaxação relevantes para o estudo

---

2.1 Descrição da Multifísica de Jatos Eletrohidrodinâmicos

Os jatos eletrohidrodinâmicos surgem devido à interação de forças eletromecânicas num fluido submetido a um campo elétrico. Neste capítulo será feita a descrição detalhada desses mecanismos.

2.1.1 Princípio do Cone de Taylor

Quando um líquido é submetido a um campo elétrico externo e, se este último for suficientemente intenso, pode ocorrer um cone agudo de líquido, a partir do qual, se as condições o permitirem, se forma um jato fino. Este cone é conhecido como "Cone de Taylor", em homenagem ao físico Geoffrey Ingram Taylor, que fez contribuições significativas para a compreensão deste efeito nos anos 1960 [36]. A formação do Cone de Taylor é uma manifestação direta da interação entre as forças eletrostáticas e as forças de tensão superficial. Em essência, sob a influência de um campo elétrico, as cargas elétricas acumulam-se na superfície do líquido. A repulsão entre as cargas semelhantes provoca uma força que age contra a tensão superficial, que tende a manter a superfície do líquido coesa de forma uniforme, em exemplo, a forma habitual do menisco. Quando a força eletrostática consegue superar a tensão superficial, o cone emite um jato eletrohidrodinâmico. Este cone pode ser visto na Figura 2.1, onde o líquido é representado por Ω_1 e o ambiente externo (ar) é o Ω_2. Na mesma figura vemos um bocal capilar que está a um potencial elétrico Φ e pelo qual entra o líquido.
As forças atuantes no cone de Taylor são as seguintes,

1. **Força Elétrica (Força de Maxwell)** Esta força resulta da interação do campo elétrico com as cargas no fluido,

$$\mathbf{f}_e = \rho_e \mathbf{E}. \quad (2.1)$$

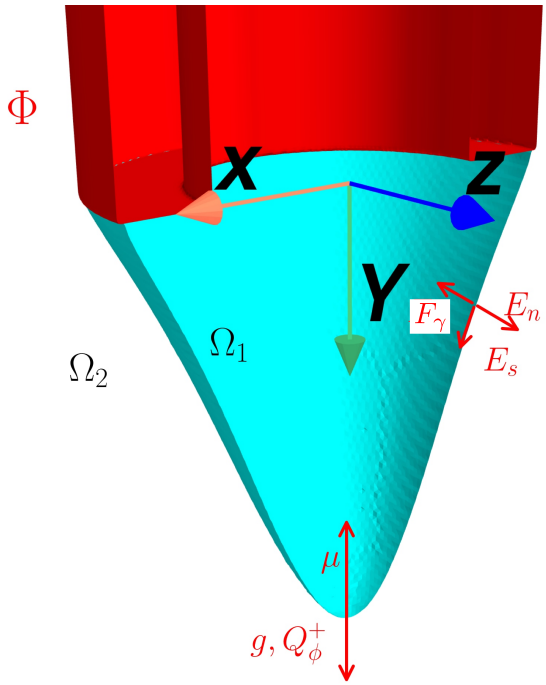


Figura 2.1: Esquema das forças eletrostáticas e hidrodinâmicas a atuar na formação de um cone de Taylor.

2. **Força de Tensão Superficial** Atua na superfície livre, resistindo à formação do cone, onde γ é a tensão superficial e S a superfície livre do líquido,

$$\mathbf{f}_\gamma = \gamma \nabla S. \quad (2.2)$$

3. **Força de Polarização** Surge devido à interação do campo elétrico com polarizações induzidas no fluido,

$$\mathbf{f}_{Q^+} = \nabla \cdot (\mathbf{P} \otimes \mathbf{E}) - \mathbf{P} \cdot \nabla \mathbf{E}. \quad (2.3)$$

4. **Força Gravitacional** Dependendo da situação, a gravidade pode ser relevante,

$$\mathbf{f}_g = \rho \mathbf{g}. \quad (2.4)$$

5. **Forças Viscosas** Estas forças resistem ao movimento do fluido,

$$\mathbf{f}_\mu = \mu \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (2.5)$$

6. **Força de Pressão** Resulta de diferenças de pressão dentro do fluido,

$$\mathbf{f}_p = -\nabla p. \quad (2.6)$$

2.1.2 Instabilidades de Rayleigh-Plateau

A quebra de um jato de líquido em gotículas, desencadeada pela tensão superficial, foi investigada inicialmente por Plateau na segunda metade do século XIX. Anos mais tarde, Rayleigh deduziu uma relação entre o raio do jato líquido e o comprimento de onda dominante. Com base no conceito da perturbação de crescimento mais rápido determinou-se a dimensão das gotículas para um fluido ideal na ausência de um meio exterior. Mais tarde, estes estudos formaram a teoria da instabilidade de Rayleigh-Plateau de jatos viscosos [77].

A instabilidade de Rayleigh-Plateau, originalmente observada em colunas de líquido sob a influência da gravidade, descreve o fenómeno pelo qual um jato ou coluna de fluido se quebra em gotículas para minimizar a energia superficial. Esta instabilidade é de particular interesse na eletrohidrodinâmica (EHD), onde forças elétricas podem induzir ou alterar a quebra de jatos líquidos. Para um jato de fluido cilíndrico com raio R, uma pequena perturbação no raio pode levar a uma redução na área superficial e, consequentemente, na energia potencial do sistema. Se a perturbação tiver um comprimento de onda específico, ela pode crescer ao longo do tempo, levando ao rompimento do jato. Considerando uma coluna de líquido de raio R_j imerso em outro líquido ou gás, e introduzindo uma perturbação sinusoidal de amplitude a e comprimento de onda λ, a taxa de crescimento desta perturbação é dada por,

$$\sigma^2 = \frac{\gamma}{\rho R_j^3}\left(1 - \left(\frac{2\pi R}{\lambda}\right)^2\right), \quad (2.7)$$

onde γ é a tensão superficial e ρ é a massa específica do líquido. A análise linear da instabilidade de Rayleigh-Plateau revela que o comprimento de onda mais instável é dado por,

$$\lambda_{\text{crit}} = 2\pi R_j \sqrt{\frac{2}{3}}. \quad (2.8)$$

A tensão superficial, por sua vez, é descrita pela Lei de Laplace que, no caso de um jato cilíndrico, pode ser escrita como,

$$\Delta p = \gamma \cdot \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right), \quad (2.9)$$

onde Δp é a diferença de pressão através da interface do fluido, R_1 e R_2 são os raios de curvatura da interface.

Em sistemas EHD, a presença de um campo elétrico introduz uma força adicional sobre o fluido, possivelmente alterando o comportamento da instabilidade. A força elétrica que age sobre o fluido, devido à presença de cargas elétricas, pode estabilizar ou desestabilizar o jato, dependendo das condições.

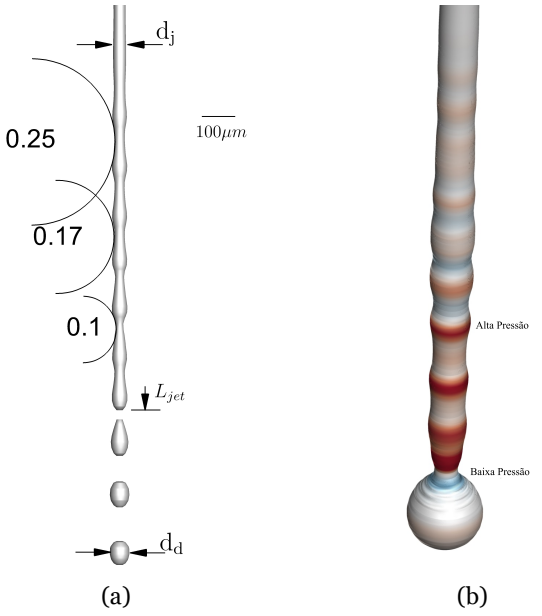


Figura 2.2: Demonstração da instabilidade de onda devido à tensão superficial (a) ilustração dos raios das instabilidades [4] e (b) pressão nos nós e anti-nós da onda [5].

A tensão superficial de um fluido sempre tenta minimizar a área de superfície. Para uma coluna de líquido com uma superfície levemente perturbada, as regiões mais finas têm uma área superficial maior em relação ao seu volume comparativamente com as regiões mais espessas. Como resultado, a tensão superficial faz com que a coluna de líquido se quebre em gotas, cada uma das quais tem uma razão área/volume menor do que a da coluna inicial, como a Figura 2.2 mostra. A secção superior do jato, é a região contínua do jato com um diâmetro constante de d_j. À medida que o jato evolui a instabilidade de Rayleigh-Plateau aumenta e, por fim, o jato quebra em gotas com o diâmetro d_d

2.1.3 Instabilidades de Ondulação

O jato emitido pelo cone de Taylor mantém uma trajetória linear inicial durante uma curta distância (de alguns milímetros a centímetros), após isto o jato pode sofrer um fenómeno chamado instabilidade de ondulação. Este é um processo complexo e ainda não totalmente compreendido, em que o jato se curva e se bifurca de maneira irregular e caótica. As instabilidades de ondulação são causadas pela interação de forças elétricas, viscosas e inerciais no jato.

A Figura 2.3 mostra este efeito de ondulação, também conhecido por chicote [78, 79]. No momento em que a primeira curva se forma pelo segmento curvilíneo abc, com um ângulo de curvatura de θ_w, a repulsão mútua das cargas elétricas em excesso carregadas pelo segmento líquido (a)(b) dá origem à força repulsiva de Coulomb (f_c). A força repulsiva líquida de Coulomb desloca-se para o ponto (b) fora da linha central, que é contrabalançada pela tensão do segmento de jato linear de (a)(c), antes da formação da curva. No ponto (a), a força de Coulomb atuante é resolvida em duas componentes: numa componente ascendente que resiste ao escoamento do jato, enquanto a componente lateral atua perpendicularmente ao jato reto, de forma a curvar lateralmente o jato reto na direção

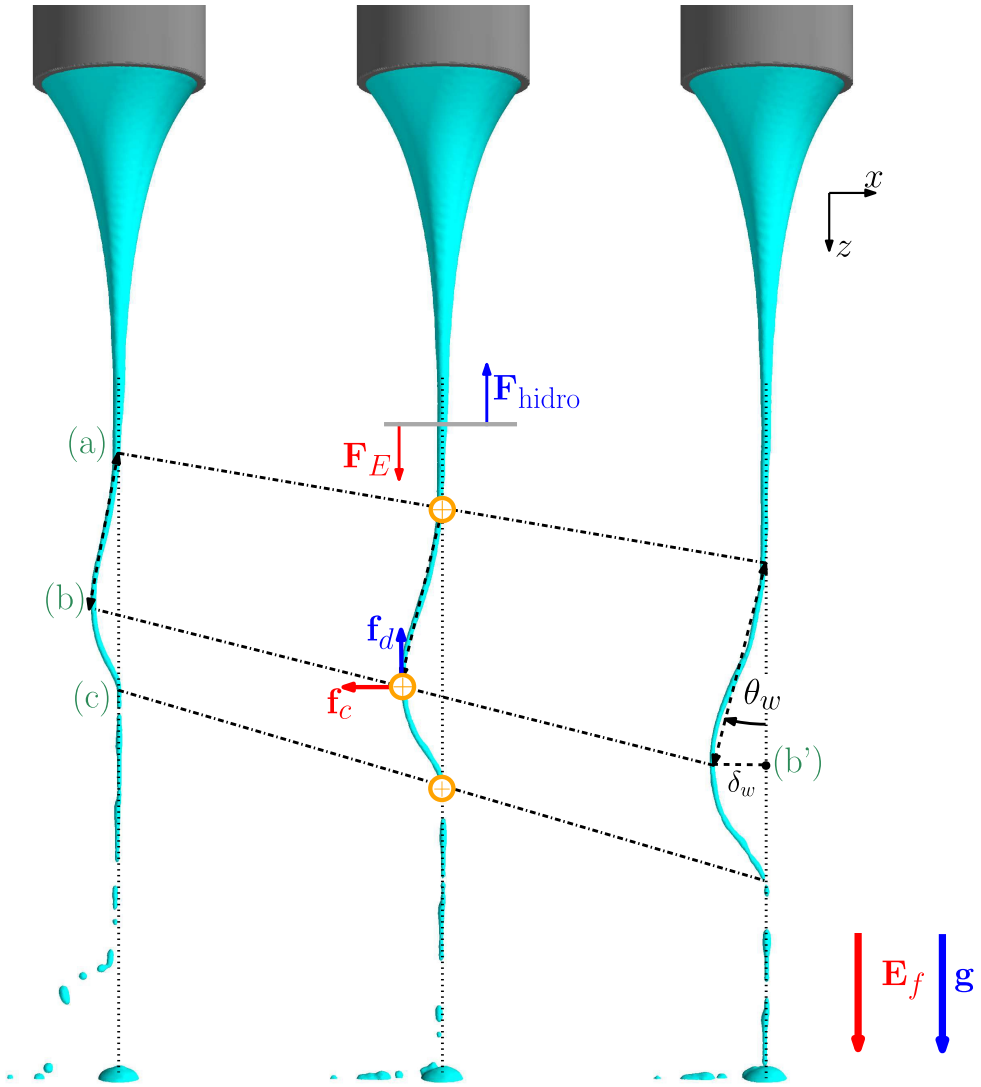


Figura 2.3: Esquema das forças atuantes e que influenciam o jato na formação da primeira onda (curva abc).

$-x$.

A atomização é o processo de formação de gotas a partir do jato. Em jatos EHD, a atomização geralmente ocorre como resultado das instabilidades de *bending* , embora outros mecanismos também possam estar em jogo, dependendo das condições específicas do escoamento. A atomização pode ser considerada como uma continuação da instabilidade eletrohidrodinâmica que levou à formação do jato. As gotas formadas a partir da atomização podem ser extremamente pequenas, tornando os jatos EHD úteis numa variedade de aplicações que requerem gotas de tamanho muito pequeno.

As instabilidades de ondulação/*bending* que se referem à formação de ondulações ou oscilações em jatos líquidos sob a influência de campos elétricos. Estas instabilidades são predominantes em jatos finos que carregam uma carga elétrica. O entendimento desta instabilidade é fundamental para diversas aplicações, especialmente em sistemas eletrohidro-

dinâmicos.
Como já mencionado, a formação dos cones de Taylor e do jato emitido é subsequente ao carregamento elétrico e acumulação de cargas distribuídas ao longo da superfície do jato. Contudo, devido à repulsão mútua entre cargas semelhantes, o jato pode-se deformar--se até chegar a uma amplitude crítica, provocando a formação de ondas radiais. Esta repulsão deve-se às forças de Coulomb.
A força de Coulomb refere-se à interação elétrica entre partículas carregadas. A forma mais básica da lei de Coulomb para a força entre duas cargas pontuais é dada por,

$$f_c = k_e \frac{q_1 q_2}{r^2}, \quad (2.10)$$

onde:

- f_c é a força de Coulomb entre as duas cargas.
- k_e é a constante eletrostática, aproximadamente igual a $8{,}9875 \times 10^9\,\mathrm{N\,m^2/C^2}$ no vácuo.
- q_1 e q_2 são as cargas das duas partículas.
- r é a distância entre as duas cargas.

Considerando três partículas individuais no jato líquido a, b e c, representadas por um $\oplus$ amarelo na Figura 2.3, temos que a força resultante a ser aplicada na carga do meio (b) é $f_r = 2f_c\cos(\theta_w)$, que por sua vez é igual a $f_r \sim 2q^2\delta_w r^{-3}$. Considerando que o ângulo é simétrico em (b), tal que, $a\hat{b}b' = c\hat{b}b'$, e que a carga elétrica é igual e ainda que a distância entre as cargas é igual, tal que $r = \|a-b\| = \|b-c\|$.
No contexto de um jato EHD, não estamos a lidar com duas cargas pontuais isoladas. Em vez disso temos uma distribuição contínua de carga ao longo da superfície do jato. Esta distribuição contínua de cargas gera uma força repulsiva ao longo do jato, pois as cargas são do mesmo sinal e repelem-se mutuamente. Esta força repulsiva é uma manifestação das forças de Coulomb e é um dos principais fatores que levam à instabilidade e eventual rompimento do jato.
Para um elemento infinitesimal do jato, com uma carga dq, a força de repulsão devido a uma carga adjacente dq', e a uma distância dr é:

$$dF_c = k_e \frac{dq \cdot dq'}{dr^2}. \quad (2.11)$$

Integrando esta expressão ao longo de todo o jato, dará a força de repulsão total devido à distribuição contínua de cargas. Na prática, calcular esta força para um jato EHD real pode ser complicado e pode envolver considerações adicionais relacionadas à geometria do jato, com a distribuição de carga, e eventualmente outros fatores.
Se considerarmos uma pequena secção do jato com um volume dV, a carga nesse volume é $dq = \rho_e \cdot dV$. No contexto de jatos EHD, a densidade de carga volumétrica, ρ_e, é uma

medida da quantidade de carga elétrica por unidade de volume.
Vamos supor que o jato tem uma geometria cilíndrica, para simplificar. Se tomarmos uma secção do jato de comprimento dr, um raio r oara uma secção axial dz, então o volume dV dessa secção é $dV = 2\pi r dr dz$ (aproximando a superfície como um anel com espessura infinitesimal).
Portanto, a carga dq em um elemento de volume dV é dada por:

$$dq = \rho_e \cdot 2\pi r dr dz. \quad (2.12)$$

Podemos assim calcular a força de repulsão num elemento em função da densidade volumétrica de carga, tal que:

$$dF_c = k_e \rho_e^2 4\pi^2 r^2 dr dz. \quad (2.13)$$

Note que esta é uma simplificação e a análise pode ser mais complexa para uma geometria não uniforme ou para outros modos de distribuição de carga. Esta expressão dá uma ideia da força de repulsão entre elementos infinitesimais de um jato EHD com uma densidade de carga ρ_e.

2.1.4 Expansão de Coulomb e Formação da pluma

O campo elétrico é representado por vetores, cuja direção indica o sentido da força que atuaria sobre uma carga positiva em análise e cuja magnitude expressa a intensidade dessa força. A presença de curvaturas nos vetores do campo elétrico sugere um campo não uniforme, possivelmente perturbado por cargas nas proximidades ou pela geometria dos elétrodos. Gotas carregadas num campo elétrico são influenciadas por uma força diretamente proporcional à carga na gota e à magnitude do campo. Esta força direciona o movimento da gota, fazendo-a seguir o traço do vetor campo. Portanto, gotas em regiões com vetores de campo curvados tenderão a mover-se ao longo dessas curvas. Por sua vez, as gotas carregadas introduzem perturbações no campo elétrico. Uma gota carregada atua como uma fonte de campo elétrico, dependendo do sinal da sua carga. Esta perturbação no campo pode, por sua vez, influenciar a trajetória e comportamento de outras gotas nas proximidades. A Figura 2.4 mostra o campo elétrico de uma simulação (que será mais à frente detalhada) e a presença de algumas gotas e a respetiva densidade de carga em cada pequeno volume de cálculo.

2.1.5 Atomização de jatos EHD: Formação de eletrospray

O processo de eletrospray é uma técnica de ionização onde um líquido é atomizado num ambiente elétrico, dando origem a gotas carregadas e eventualmente a iões. Este processo é fortemente influenciado por diversos mecanismos, tanto mecânicos como elétricos. A dinâmica do eletrospray pode ser conceptualmente dividida em várias regiões distintas,

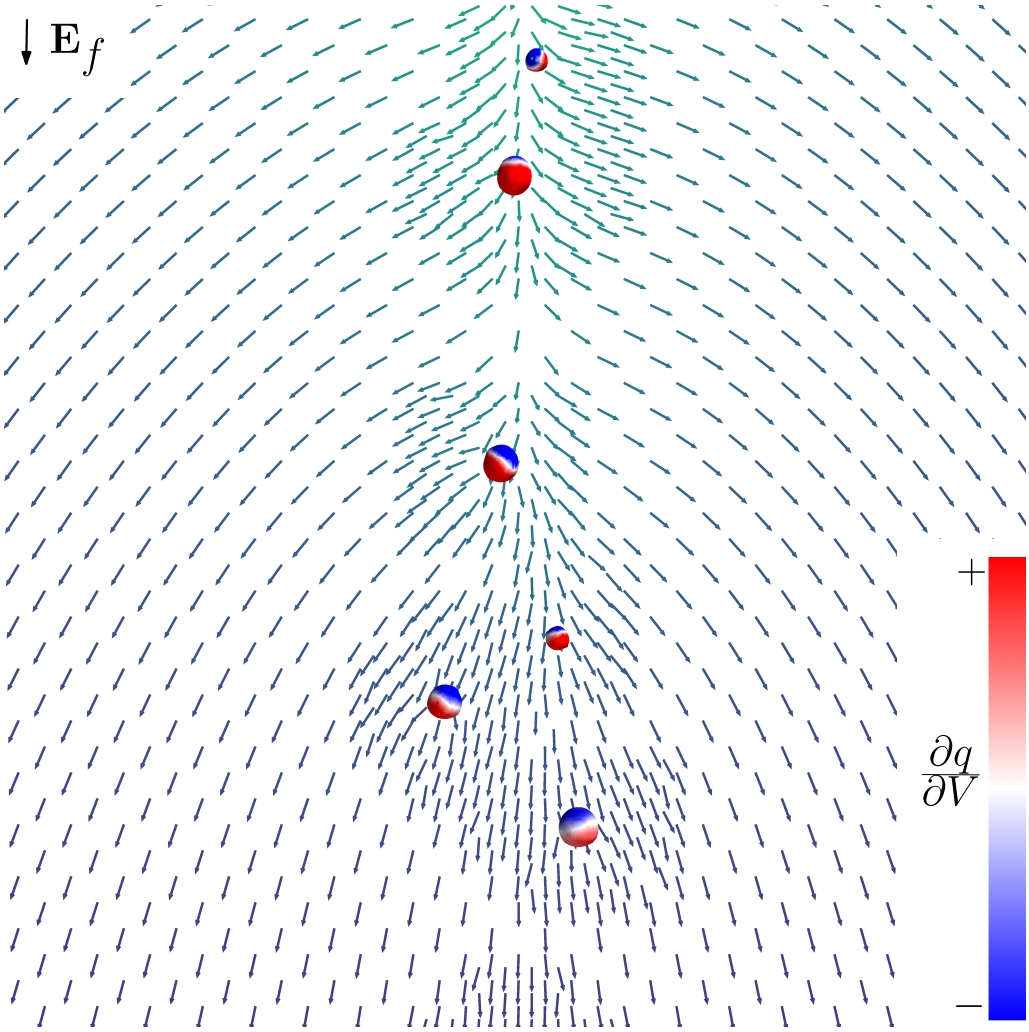


Figura 2.4: Visualização do campo vetorial do campo elétrico e da expansão eletrostática. No meio do campo estão gotas coloridas pela densidade pontual de carga elétrica.

cada uma caracterizada por fenómenos e comportamentos específicos.

1. Região de Extração: Nesta região o líquido é submetido a um campo elétrico forte, levando à formação do cone de Taylor e à subsequente emissão de um jato líquido fino. Os mecanismos dominantes aqui são a tensão superficial do líquido e as forças eletrostáticas.

2. Região de Transição: Após a formação do jato na região de extração, o jato entra numa região de transição onde as forças eletrostáticas começam a superar as forças mecânicas. Aqui o jato começa a romper-se, dando origem a gotas carregadas.

3. Região de Interação: Nesta zona as gotas carregadas interagem entre si e com o campo elétrico circundante. Estas interações podem levar a uma série de fenómenos, como à coalescência de gotas, à sua fragmentação, ou mesmo, à deflexão da trajetória devido a repulsões eletrostáticas.

4. Região da Pluma: Finalmente, na região da pluma, as gotas deslocam-se mais livremente, evoluindo sob a influência do campo elétrico e possivelmente de correntes de ar ou gás. É comum observar a dispersão das gotas e a sua eventual evaporação, levando à formação de iões.

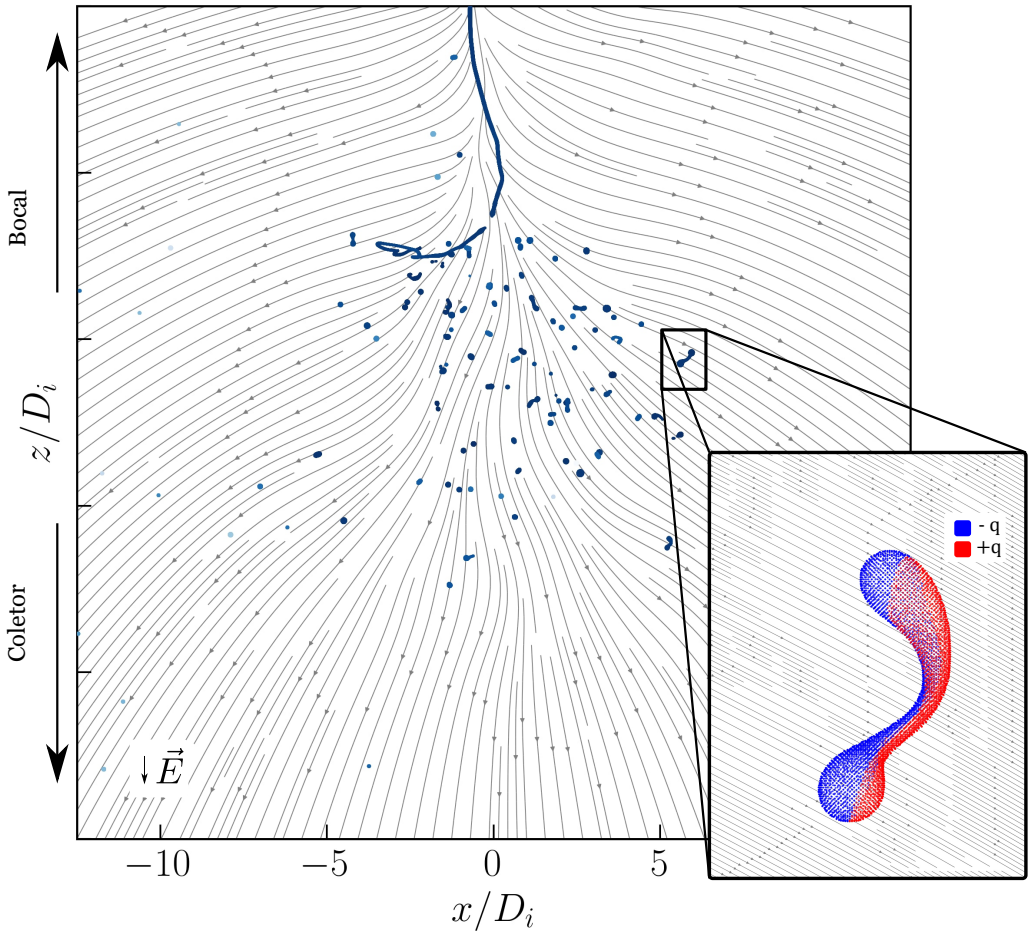


Figura 2.5: Demonstração da formação inicial de *eletrospray* com a instabilidade de *whipping* formando pequenas gotas (compare-se com o diâmetro do bocal de entrada D_i). As linhas de campo mostram o campo elétrico e como as gotas (que estão eletricamente carregadas como mostra a janela de zoom) seguem este campo vetorial.

2.2 Equações de Governo

Os jatos de cone de Taylor são considerados um problema de escoamento eletrohidrodinâmico imiscível. As equações de governo deste escoamento são uma peculiaridade da magnetohidrodinâmica (MHD) e nesta secção iremos descrever as equações de governo e as simplificações feitas para chegar à eletrohidrodinâmica (EHD). Consideramos logo de início um escoamento incompressível, isotérmico e não estacionário.

2.2.1 Conservação de massa

As equações de governo para o escoamento incompressível, isotérmico e não-estacionário são as equações de Navier-Stokes e a equação de continuidade. Na forma diferencial clássica, a equação da conservação da massa é dada por,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.14)$$

onde $\mathbf{u}$ é o campo vetorial de velocidade do fluido. Num sistema cartesiano de coordenadas a velocidade é composta por três componentes u_x, u_y e u_z.

2.2.2 Conservação da Quantidade de movimento

A equação de Navier-Stokes descreve a conservação da quantidade de movimento,

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad (2.15)$$

onde ρ é a densidade do fluido, p é a pressão, μ é a viscosidade e $\mathbf{f}$ são as forças por unidade de volume a atuar no fluido. As forças que atuam no escoamento bifásico eletrohidrodinâmico são a força da gravidade $\mathbf{f}_g$, a força devido à tensão superficial $\mathbf{f}_\gamma$ e a devida à presença de um campo elétrico $\mathbf{f}_e$. A força gravitacional é calculada de forma simples tal que $\mathbf{f}_g = \rho\mathbf{g}$, sendo $\mathbf{g}$ a aceleração vetorial gravitacional. A força devida à ação da tensão superficial e do campo elétrico requer outras considerações, que outra um pouco mais complexas, e que iremos detalhar.

2.2.3 Tensão Superficial

A força de tensão superficial que atua na interface é proporcional à curvatura da interface, tal que,

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma\kappa\mathbf{n}, \quad (2.16)$$

onde σ é a tensão superficial, κ é a curvatura da interface e $\mathbf{n}$ é o vetor normal à interface [80].

2.2.4 Equações de Maxwell. Desde a Magnetohidrodinâmica ate à Eletrohidrodinâmica

As equações de governo do campo elétrico que é aplicado nos jatos eletrcohidrodinamicos são as equações de Maxwell. Estas serão então utilizadas para calcular o campo elétrico e por sua vez a força elétrica que atua no escoamento. Para este efeito partimos da forma geral das equações de Maxwell para a Magnetohidrodinâmica e detalhamos as simplificações que podem ser feitas para o escoamento EHD.
A forma diferencial geral das equações de Maxwell é,

$$\text{Lei de Gauss para a eletricidade:} \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e, \tag{2.17}$$

$$\text{Lei de Gauss para o magnetismo :} \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \tag{2.18}$$

$$\text{Lei da indução de Faraday:} \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \tag{2.19}$$

$$\text{Lei de Ampère-Maxwell :} \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \tag{2.20}$$

Onde:

- **D** é o vetor de deslocamento elétrico, medido em C/m^2.
- ρ_e é a densidade de carga elétrica, medida emC/m^3.
- **B** é o vetor de campo magnético, medido em T (Tesla).
- **E** é o vetor de campo elétrico, medido em V/m.
- **H** é o campo magnético auxiliar, medido em A/m.
- **J** é a densidade de corrente elétrica, medido em A/m^2.
- ε_0 é a permissividade elétrica do vácuo, $\approx 8.854 \times 10^{-12}$ F/m.
- **P** é a polarização elétrica, que representa a densidade de dipolos elétricos induzidos no material, medido em C/m^2.
- μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, $4\pi \times 10^{-7}$ Tm/A.
- **M** é a magnetização, que representa a densidade de momentos magnéticos induzidos no material, medido em A/m.

Considerando que a relação entre **D** e **E** é dada por,

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}. \tag{2.21}$$

E a relação entre **B** e **H** é dada por,

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}). \quad (2.22)$$

Em materiais dielétricos, as cargas elétricas estão ligadas às moléculas individuais. Quando um campo elétrico externo é aplicado, os momentos dipolares tendem a alinhar-se com o campo elétrico. Surge, assim, um campo de densidade de polarização, $\mathbf{P}$, em relação ao campo elétrico $\mathbf{E}$. Os líquidos mais típicos são meios dielétricos isotrópicos e lineares, de modo que a densidade de polarização é dada por,

$$\mathbf{P} = (\varepsilon - \varepsilon_0)\mathbf{E}. \quad (2.23)$$

Assim a lei de Gauss para a eletricidade fica,

$$\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = \rho_e. \quad (2.24)$$

Sabendo que não existe um campo magnético a ser aplicado externamente e que as possíveis tensões induzidas devido ao movimento das cargas elétricas são desprezáveis, consideramos que o campo elétrico é irrotacional, tal que,

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0. \quad (2.25)$$

A decomposição de Helmholtz[1]pode ser aplicada ao potencial elétrico, ϕ, resultando em,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi. \quad (2.26)$$

Onde $\nabla\phi$ é o gradiente do potencial elétrico, representando a componente irrotacional do campo elétrico.

2.2.5 Tensor de Maxwell

Neste trabalho o tensor eletromecânico identificado como estando a atuar no escoamento, devido ao campo elétrico, é o Tensor de Maxwell [81], dado por,

$$T_{ij} = \varepsilon \left(E_i E_j - \frac{1}{2}\delta_{ij} E^2 \right), \quad (2.27)$$

onde E_i e E_j são as componentes do campo elétrico e δ_{ij} é o delta de Kronecker.

[1]representação de um campo vetorial como a soma de um campo irrotacional (divergência livre) e um campo solenoidal (rotação livre)

No contexto eletrostático, podemos expressar a densidade de energia w num dielétrico como,

$$w = \frac{1}{2}\varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}. \quad (2.28)$$

A força eletrostática por unidade de volume, deduzida a partir da densidade de energia é,

$$\mathbf{f} = -\nabla w + \mathbf{E}(\nabla \cdot \mathbf{P}), \quad (2.29)$$

onde $\mathbf{P}$ é a polarização.
Para um meio dielétrico linear, a relação entre $\mathbf{P}$ e $\mathbf{E}$ é,

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi_e \mathbf{E}, \quad (2.30)$$

onde χ_e é a suscetibilidade elétrica.
Utilizando a relação entre $\mathbf{P}$ e $\mathbf{E}$ e a definição do tensor de Maxwell, a força por unidade de volume torna-se,

$$\mathbf{f} = \mathbf{E} \cdot \nabla \mathbf{E} - \frac{1}{2}\nabla E^2. \quad (2.31)$$

E, portanto, o tensor de Maxwell para um dielétrico isotrópico é expresso na forma,

$$T = \varepsilon \mathbf{E}\mathbf{E} - \frac{1}{2}\varepsilon E^2 \mathbf{I}. \quad (2.32)$$

2.2.6 Conservação da Carga Elétrica

A conservação da carga elétrica é dada por,

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.33)$$

onde ρ_e é a densidade de carga elétrica e $\mathbf{J}$ é a densidade de corrente elétrica.
A equação 2.33 corresponde à conservação das cargas elétricas livres do volume, ρ_e, onde $\boldsymbol{J}$ é o vetor da densidade de corrente elétrica também conhecido como o fluxo de carga elétrica. Este fluxo é calculado como a soma da condução, devido à condutividade elétrica σ das fases, e também da convecção das cargas elétricas, de modo que,

$$\boldsymbol{J} = \sigma \boldsymbol{E} + \rho_e \boldsymbol{u}. \quad (2.34)$$

Isto significa que podemos rearranjar a equação tal que,

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot (\sigma \boldsymbol{E}) = 0. \quad (2.35)$$

A lei de Gauss afirma assim que num material de permissividade constante, ε, a divergência do campo elétrico, $\nabla \cdot \boldsymbol{E}$, é igual à densidade de carga elétrica volumétrica, ρ_e. Além disso, o cálculo do campo elétrico, $\boldsymbol{E}$, é possível com a conhecida equação de Poisson para a eletrostática, introduzindo o respetivo potencial elétrico ϕ_e. Esta equação é uma forma da lei de indução de Faraday. Como o potencial elétrico aplicado é estático, as correntes dinâmicas são consideravelmente pequenas e, por essa razão específica, não há indução magnética significativa [46]. Esta conclusão permite-nos considerar que a lei de indução de Faraday pode ser simplificada.
A força volumétrica no volume $\boldsymbol{f}_e$ é calculada com o tensor de Maxwell (Maxwell Stress Tensor - MST) [82]. Este MST ($\mathbf{T}$) é uma força por unidade de área atuando na superfície, por conseguinte, a força por volume inserida na equação de momento é igual à divergência do MST.

$$\boldsymbol{f}_e = \nabla \cdot \mathbf{T}, \qquad \mathbf{T} = \varepsilon \left(\boldsymbol{E}\boldsymbol{E} - \frac{1}{2}||\boldsymbol{E}||^2 \boldsymbol{I} \right), \quad (2.36)$$

onde $\boldsymbol{I}$ é o tensor unitário. A divergência do MST produzirá uma força de corpo no domínio, com uma magnitude significativa na região da interface, devido ao gradiente da permissividade e do potencial elétrico envolvidos. Como consideramos um escoamento incompressível, não há variação da permissividade elétrica com a densidade nas fases [83], logo a força elétrica volumétrica, $\boldsymbol{f}_e$, pode ser expressa como,

$$\boldsymbol{f}_e = \rho_e \boldsymbol{E} - \frac{1}{2} E^2 \nabla \varepsilon, \quad (2.37)$$

O primeiro termo no lado direito da equação está relacionado com as forças de Coulomb e o segundo termo compreende as forças de Lorentz. A implementação da força elétrica diretamente na equação do momento implica um acoplamento direto da dinâmica do escoamento na malha computacional.

2.3 Escalas Temporais e Grupos Adimensionais Relevantes

Na dinâmica de fluidos é uma prática comum e útil expressar a dinâmica do escoamento em função de diferentes números de relaxação, que representam a razão entre as diferentes forças, tempos ou ainda escalas de comprimento que são caraterísticas do problema em estudo. No nosso estudo temos uma ligação complexa entre inércia, capilaridade (tensão

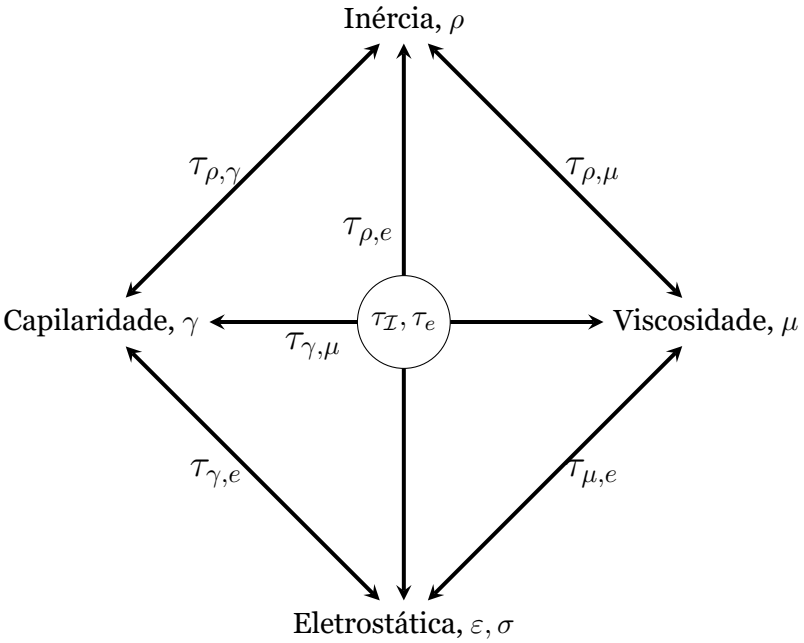


Figura 2.6: Diagrama representando as inter-relações entre inércia, capilaridade, viscosidade, e força eletrostática com seus respetivos tempos de relaxação.

superficial), viscosidade e permitividade[2]. A Figura 2.6 mostra a ligação entre as diferentes forças a atuar sobre o jato EHD e os seus tempos de relaxação característicos.
As escalas temporais associados com este trabalho são as seguintes,

Escala inercial	$\tau_{\mathcal{I}} = \dfrac{\mathcal{L}}{\mathcal{V}}$	(2.38)
Escala eletroestática	$\tau_e = \dfrac{\varepsilon}{\sigma}$	(2.39)
visco-capilar	$\tau_\mu = \dfrac{\mu L}{\gamma}$	(2.40)
capilar-inercial	$\tau_\gamma = \sqrt{\dfrac{\rho L^3}{\gamma}}$	(2.41)
visco-inercial	$\tau_\rho = \dfrac{\rho L^2}{\mu}$	(2.42)
eletro-inercial	$\tau_{\rho,e} = \sqrt{\tau_e \tau_\rho}$	(2.43)
eletro-capilar	$\tau_{\gamma,e} = \sqrt{\tau_e \tau_\gamma}$	(2.44)
visco-eletro	$\tau_{\mu,e} = \sqrt{\tau_e \tau_\mu}$.	(2.45)

Existem vários números adimensionais que são relevantes para o estudo de jatos eletrohidrodinâmicos. Esses números caracterizam o comportamento do sistema e fornecem informações sobre a importância relativa de diferentes forças físicas. Aqui são definidos os principais e mais relevantes para jatos líquidos [84]. Um dos mais relevantes na dinâmica de fluidos e consequentemente importante para este estudo, é o número de Reynolds (Re),

[2] A permitividade é o parâmetro característico do escoamento EHD, em oposição à condutividade, considerando que a investigação não incorpora líquidos iónicos (alta-condutividade elétrica).

que relaciona a forças inerciais com as viscosas,

$$Re = \frac{\rho \mathcal{V} \mathcal{L}}{\mu} = \frac{\tau_\rho}{\tau_\mathcal{I}}, \quad (2.46)$$

onde $\mathcal{V}$ é a velocidade característica, $\mathcal{L}$ é o comprimento característico (diâmetro do jato EHD) e μ é a viscosidade dinâmica. Em jatos eletrohidrodinâmicos o número de Reynolds pode ainda ajudar a determinar se o escoamento é laminar ou turbulento. Sendo que na maioria dos casos de aplicação estes jatos são laminares. Como temos forças capilares a comparação entre a inércia e viscosidade e as forças capilares (de tensão superficial) é útil. A relação entre as forças inerciais e de tensão superficial é dada pelo número de Weber, definido como,

$$We = \frac{\rho \mathcal{V}^2 L}{\gamma} = \left(\frac{\tau_\gamma}{\tau_\mathcal{I}} \right)^2, \quad (2.47)$$

onde γ é a tensão superficial. O número de Weber é particularmente relevante para a atomização dos jatos EHD. O processo de atomização ocorre quando as forças inerciais superam as forças de tensão superficial que mantêm o fluido unido. Em situações em que o número de Weber é alto, as forças inerciais dominam e favorecem a formação de gotas menores. Por outro lado, quando o We é baixo, a tensão superficial prevalece, levando à formação de gotas maiores ou à prevenção da atomização.
O número de Reynolds e de Weber são os dois dominantemente característicos do escoamento de jatos líquidos (de componente único e newtoniano). Contudo per si não trazem *insights* específicos para os estudos em microfluidica, jatos capilares e atomização de gotas. Para tal dois outros números são usados para quantificar a relação entre forças viscosas, inerciais e de tensão superficial. O primeiro é o número de capilaridade Ca, também conhecido por número de Eötvös, que relaciona as forças viscosas e as forças de tensão superficial, definido como,

$$Ca = \frac{We}{Re} = \frac{\mu \mathcal{U}}{\gamma} = \frac{\tau_{\mu,\gamma}}{\tau_\mathcal{I}}. \quad (2.48)$$

Em certos contextos, é útil saber qual das forças é dominante sem necessariamente envolver as forças inerciais. Por exemplo, na dinâmica de gotas em que a força da gravidade é desprezável na deformação da gota. Para relacionar as forças viscosas, inerciais e de tensão superficial temos o número de Ohnesorge Oh, especialmente útil em estudos de atomização quando as forças viscosas desempenham um papel importante, definido por,

$$Oh = \frac{We^{1/2}}{Re} = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \gamma \mathcal{L}}} = \frac{\tau_\gamma}{\tau_\rho}. \quad (2.49)$$

Agora focando não forças eletrostáticas que também atuam no nosso escoamento temos

primeiro o número de Reynolds elétrico Re_E

$$Re_E = \frac{\varepsilon \mathcal{V}}{\sigma \mathcal{L}} = \frac{\tau_e}{\tau_{\mathcal{I}}}. \quad (2.50)$$

Analogamente temos o número de capilaridade elétrico Ca_E, dado por,

$$Ca_E = \frac{\mu \mathcal{V}}{\gamma} = \frac{\varepsilon \mathcal{L} E^2}{\gamma}. \quad (2.51)$$

Esta fórmula assume que a velocidade característica é o balanço entre as forças da viscosidade e da eletrostática $\mathcal{V} = \varepsilon E^2/\mu$ [85].

2.4 Leis de Escala

Ao analisar o comportamento dos eletrosprays é necessário ter em conta as diferentes escalas em que os diferentes fenómenos ocorrem. Estas escalas vão desde o pequeno diâmetro do jato até à distância entre o bocal capilar e o coletor. A grande disparidade de escalas e o elevado número de variáveis envolvidas (propriedades físicas do fluido, geometria dos elétrodos, bem como as variáveis do processo) têm dificultado a compreensão completa dos mecanismos que controlam a formação do eletrospray. Isto levou à controvérsia sobre quais os mecanismos dominantes em diferentes condições. Uma região difícil de analisar é aquela em que o cone de Taylor, após a formação de um jato fino, se quebra em pequenas gotículas. Um grande esforço tem sido dedicado à procura das leis de escala que regem este processo, ou seja, as relações adimensionais das variáveis e as suas potências, os quais permanecem aproximadamente constantes para uma certa gama de operações de eletrospray.
As ferramentas mais úteis para os utilizadores de *eletrospraying* são as leis de escala que preveem a ordem de grandeza do tamanho e da carga das gotículas emitidas. Após intensivos estudos experimentais [86, 40, 87, 88] foi provado que as gotas emitidas seguem a lei de escala dada por,

$$d_d = d_0 \left(\frac{Q}{Q_0} \right)^{1/2}. \quad (2.52)$$

Onde d_d é o diâmetro das gotas emitidas e Q o caudal de operação. Estes são normalizados por dois importantes grupos não dimensionais,

$$d_0 = \left[\gamma \varepsilon_0^2 \rho^{-1} \sigma^{-2} \right]^{1/3}, \quad Q_0 = \gamma \varepsilon_0 / \rho \sigma, \quad (2.53)$$

Os efeitos de inércia no líquido são normalizados por $\rho(QR_d^{-2})^2$ e, como discutido acima, a força eletrostática atuante é normalizada por $\varepsilon_0(E_0^2)$. Comparando os dois e utilizando

os grupos não dimensionais discutidos anteriormente, é possível determinar a escala da magnitude do campo elétrico como,

$$E_0 \sim \left(\frac{\gamma}{\varepsilon_0 d_0}\right)^{1/2}. \quad (2.54)$$

O valor padrão E_∞ é calculado como $E_\infty = \tilde{\phi}_e/H$ e pode ser relacionado com E_0 como $E_0^* = E_\infty/E_0 = 1{,}24$. A escala do potencial elétrico é $\phi_{e,0} = E_0 d_0$, que é utilizada aqui para normalizar a condição de funcionamento [89].

A força elétrica volumétrica pode ser obtida a partir da integração do tensor de Maxwell na superfície ($\sim \varepsilon_0 E_0^2$). Sendo que se pode obter um valor de referência da força eletrostática a partir de $f_{e,0} \sim \varepsilon_0 E_0^2/R_i = (\gamma/d_0)/R_i$. Com esta definição a lei de escala para a corrente elétrica transportada pelo jato, a uma velocidade $u_j \sim QR_j^2$, segundo [90] é dada por,

$$I_e \sim (\gamma\sigma Q) = I_0 \left(\frac{Q}{Q_0}\right)^{1/2}. \quad (2.55)$$

Contudo esta lei de escala durante muito tempo mostrou discrepância com a realidade, até que através de estudos intensivos de [91], tal que com mais de 2000 testes experimentais obteve-se a seguinte regressão para o caudal de entrada,

$$\frac{I}{I_0} = 2.6 \left(\frac{Q}{Q_0}\right)^{1/2}. \quad (2.56)$$

Por fim, a lei da escala para o tamanho estável do jato, emitido pelo cone de Taylor L_j, dado pelo balanço entre o transporte por condução e convecção das cargas é dado por,

$$\sigma\gamma(\varepsilon_0 L_j)^{-1} R_j^2 \sim \varepsilon_0 E_0 Q R_j^{-1} \rightarrow L_j \sim d_0 \left(\frac{Q}{Q_0}\right). \quad (2.57)$$

Uma outra relação importante é a relação entre o ângulo do cone e a tensão superficial: A relação entre o ângulo de abertura do cone, θ, e a tensão superficial, σ, foi estabelecida como,

$$\cos\theta \approx \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (2.58)$$

Este resultado sugere que o ângulo de abertura do cone é aproximadamente constante, coindidindo com resultados experimentais [7] com um valor de cerca de $49.3°$.

2.5 Resumo

Considere um domínio Ω_0 durante um intervalo de tempo $t \in [0, T]$. As equações de governo para a conservação de massa, quantidade de movimento, densidade de carga elétrica e campo elétrico são apresentadas a seguir:

Conservação da Massa (Equação da Continuidade):

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{em } \Omega_0 \times [0, T]. \tag{2.59}$$

Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad \text{em } \Omega_0 \times [0, T]. \tag{2.60}$$

Conservação da Densidade de Carga Elétrica:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot (\sigma \boldsymbol{E}) = 0. \tag{2.61}$$

Campo Elétrico:

$$-\varepsilon \nabla^2 \phi = \rho_e. \tag{2.62}$$

As forças a que as gotas emitidas por um jato EHD irão estar sujeitas são: uma força elétrica da ordem $\sim \mathbf{f}_e \equiv \varepsilon_0 \phi_e^2$; uma força gravitacional (no mesmo sentido do campo elétrico) e da ordem de $\sim \mathbf{f}_g \equiv \rho d_d^3 \mathbf{g}$; uma força inercial devida à quantidade de movimento injetada no bocal e tal que $\mathbf{f}_p \equiv \rho Q_i^2 / D_i^2$ e, por fim, uma força capilar de oposição ao campo elétrico da ordem $\sim \mathbf{f}_\gamma \equiv \gamma D_0$ [3].
Em resumo, as equações de governo aqui resumidas têm como hipóteses/simplificações:

- Escoamento incompressível: Assume-se que a densidade do fluido é constante e não varia com a pressão ou outras variáveis.
- Fluidos não-miscíveis: Os diferentes fluidos (ou fases) não se misturam e mantêm uma interface distinta.
- Tensões induzidas desprezáveis: Despreza-se qualquer tensão devido a efeitos eletromagnéticos.
- Escoamento laminar: Despreza-se a turbulência e as suas complexidades associadas.
- Campo elétrico estacionário: As variações temporais do campo elétrico são negligenciadas.
- Geometria fixa: A estrutura ou geometria que contém o fluido não se deforma ou move em resposta ao escoamento ou a forças externas.

[3] Aqui usa-se o diâmetro externo do bocal D_0 nas condições em que o cone de Taylor molha o bocal e fica preso à extremidade do boca. No entanto sabemos também que mesmo que isto não seja o caso podemos assumir que $D_0/D_i \sim 1$

- Propriedades do fluido constantes: A viscosidade e outras propriedades relevantes são consideradas constantes e não variáveis.
- Condição isotérmica: Não há variação de temperatura no domínio.
- Sem evaporação: Os fluidos não evaporam, independentemente das condições.
- Cargas elétricas constantes: As cargas elétricas no fluido são conservadas.

Capítulo 3

Modelação Numérica de Escoamentos Eletrohidrodinâmicos Bifásicos

---

A modelação matemática fornece uma ferramenta crucial para a análise e previsão do comportamento dos jatos eletrohidrodinâmicos. Através da implementação de modelos teóricos em ambientes de simulação é possível investigar as características mais complexas destes jatos, como os padrões de atomização e a formação de gotas, e isto sem a necessidade de realizar experiências longas e dispendiosas.
Neste capítulo apresentamos uma abordagem para a modelação de jatos EHD utilizando como código base OpenFOAM, um conhecido software de criação de modelos de simulação numérica baseado no métodos de volumes finitos (FVM). Iremos apresentar o modelo físico-matemático subjacente à simulação, discutindo as equações fundamentais que governam o escoamento e a atomização em jatos EHD, bem como os parâmetros específicos necessários para a sua aplicação.
Também iremos descrever a metodologia utilizada para implementar este modelo no ambiente OpenFOAM, delineando os passos críticos para criar e executar a simulação, assim como os desafios associados a esta implementação. Em resumo, este capítulo apresenta uma proposta de modelo de simulação de jatos EHD baseada,

- Num método de volume de fluido (VoF);
- O tratamento algébrico e geométrico da interface do escoamento bifásico;
- O tratamento dos termos temporais;
- O tratamento das condições de fronteira e imposições temporais;
- Um método baseado em partícula discreta (LPT);
- Uma proposta de modelo híbrido VoF-LPT.

3.1 Introdução

A premissa básica de um método numérico que resolve as equações de governo de um problema físico-matemático é a procura da solução para o domínio computacional discretizado, que compreende um número finito de nós computacionais, tanto no espaço como no tempo. Em geral o objetivo é fornecer uma representação adequada da solução para o domínio físico contínuo. Isto diz respeito tanto à precisão como exatidão da solução numérica aproximada. Além disso, é premissa que ao aumentar o número de nós computacionais (até ao infinito) a solução numérica aproximada deve tender para da solução exata. A Figura 3.1 ilustra o que é a discretização do espaço de resolução das equações.

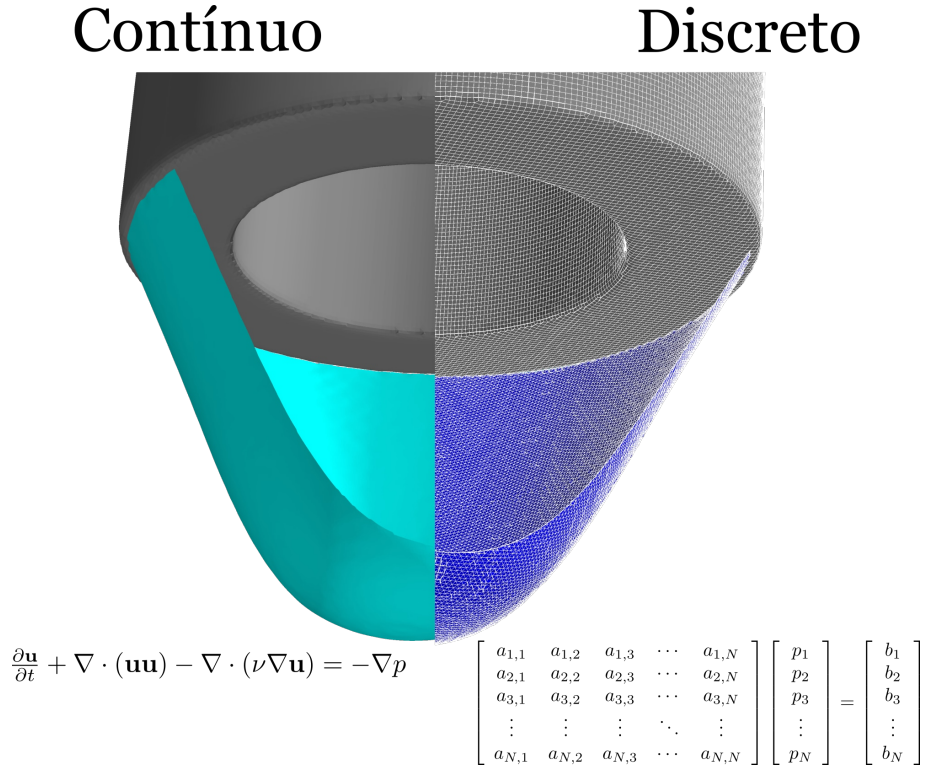


Figura 3.1: Ilustração do processo de discretização do espaço contínuo em discreto, as equações de governo passam a ter a forma matricial que é discreta e correspondem aos diferentes pontos da malha computacional.

A metodologia e resolução numérica pode ser classificada em três etapas consecutivas,

1. **Discretização do domínio**

   A discretização do domínio refere-se à subdivisão do domínio físico contínuo em subdomínios, tanto no espaço (discretização espacial) como no tempo (discretização temporal). Consequentemente, os subdomínios espaciais são designados por volumes de controlo V_c, ou simplesmente células, cujo conjunto define e delimita o domínio espacial da solução. Da mesma forma, os subdomínios temporais são designados doravante por passos de tempo δt.

2. **Discretização das equações de transporte**

   Após ter o domínio geométrico temos de discretizar as equações de governo, as quais estabelecem o modelo matemático. Estas são então integradas em cada volume de controlo. Posteriormente os integrais de volume são traduzidos em integrais de superfície aplicando o teorema de Gauss [92]. Por utilização de interpolação (esquemas de diferenciação), os valores das variáveis dependentes nas superfícies dos volumes de controlo são reescritos em termos de valores centrados nas células. Estes valores são necessários para a avaliação dos integrais de superfície e, eventualmente, permitem escrever um conjunto de equações algébricas para as variáveis dependentes em cada célula em termos de valores das variáveis nas células vizinhas. Finalmente, o conjunto de equações algébricas para uma determinada variável dependente está pronto para a sua resolução numérica.

3. **Discretização das equações de transporte**

   O processo de resolução das equações de transporte na forma discreta deve geralmente ser visto a dois níveis distintos

   - **A nível central** Aqui se incluem os métodos de de solução para obter a solução de um sistema de equações algébricas. A nível interno, os métodos de solução podem ser agrupados de acordo com a sua utilização de métodos diretos ou de métodos iterativos.
   - **A nível superior** Aqui incluem as componentes do algoritmo de resolução que lidam com múltiplas equações discretas de transporte. Estes devem garantir a precisão e a correção do resultado. Estes algoritmos computacionais podem ser classificados em abordagens de bloco, onde todas as equações são resolvidas como um conjunto de equações simultâneas, ou abordagens segregadas onde cada variável é calculada individualmente.

   Neste trabalho utilizaremos os métodos iterativos para resolver o sistema de equações algébricas (nível central) e a abordagem segregada para o conjunto global de equações de governo discretizadas (nível superior). Relativamente aos métodos iterativos estes são unicamente ferramentas matemáticas que nos permitem obter a solução do sistema de equações algébricas, por esta razão, os escolhidos não serão estudadas em pormenor porque fogem do âmbito da tese, podendo ser obtidas mais informações em [93].

Este trabalho utiliza o software de ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) de código aberto OpenFOAM [94] para implementar um novo modelo capaz de calcular a dinâmica completa de jatos EHD formados por cone de Taylor.

3.2 Método dos Volumes Finitos

O método dos volumes finitos (FVM) é o de base do OpenFOAM [95] e usa uma metodologia colocalizada numa malha computacional poliédrica, não estruturada, com elementos de malha arbitrários. As propriedades que definem a dinâmica do fluido estão centradas nos centróides do volume de controlo. Em seguida iremos descrever a discretização em mais detalhe.

3.2.1 Discretização do espaço

Numa primeira fase, o domínio computacional é decomposto num conjunto de volumes de controlo não sobrepostos, designados por células, e delimitados por faces planas. A Figura 3.2 representa dois volumes de controlo (também denominadas células de cálculo) utilizados no processo de discretização em volumes finitos. Nesta ilustração temos representado $\mathbf{d}_f$, o vetor que representa a posição relativa entre o centróide P e o centróide vizinho N. O vetor $\mathbf{S}_f$ representa o vetor normal à face f, com módulo igual à área da face e a apontar para fora do V_c do ponto P.

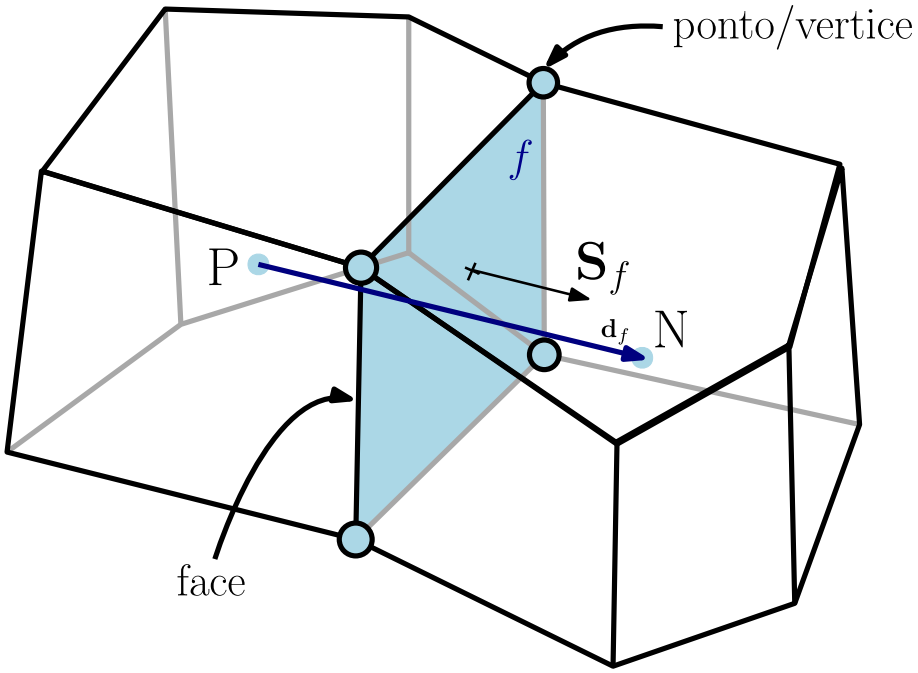


Figura 3.2: Volume de controlo típico utilizado numa discretização em volumes finitos, onde $\mathbf{d}_f$ é o vetor que representa a distância entre o centróide P e o centróide N, e $\mathbf{S}_f$ é o vetor normal à face f com módulo igual à área da face e a apontar para fora do VC que possui o ponto P. Estas duas células de forma arbitrária são separadas por uma face f. As grandezas primárias são definidas nos centros das células C_P e C_N, as grandezas secundárias podem ser definidas nos centros das faces C_f .

Note-se que as células são *contíguas*, ou seja, as faces de uma dada célula são comuns às células vizinhas (exceto se estas formarem o limite do domínio de solução). Não há restrições quanto ao alinhamento das células com os eixos de coordenadas. Para uma dada célula as variáveis primárias são calculadas no seu centróide, definido pela integração sobre o volume de controlo V_c, tal que,

$$\phi = \frac{1}{V_c}\int_{V_c} \mathrm{r}\mathrm{d}V. \quad (3.1)$$

Cada face f do domínio de cálculo é partilhada, no máximo, por duas células. As propriedades adicionais necessárias para obter a solução numérica podem ser definidas no centróide das faces das células, definido de forma semelhante aos centróides das células, tal que,

$$\phi_f = \int_{S_f} \mathrm{r}\mathrm{d}S. \quad (3.2)$$

Os vetores de área das faces S_f são vetores normais às faces com um módulo igual à sua área. Por convenção os vetores de área da face apontam para o exterior, para uma célula vizinha N.

No método FVM as variáveis desconhecidas primárias estão localizadas nos centróides das células. O acoplamento entre estas variáveis desconhecidas é efetuado através de fluxos

associados aos centros das faces. A discretização espacial permite a criação de malhas não estruturadas arbitrárias, onde não é imposta qualquer restrição ao número de faces de cada volume de controlo, proporcionando flexibilidade ao processo de geração da malha.

3.2.2 Discretização da equação de transporte

Após a definição do domínio onde se vai obter a solução podemos passar à discretização da equação de transporte, que é aproximada para cada um dos volumes de controlo. Para a propriedade escalar ϕ a equação de transporte é dada por,

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{temporal}} + \underbrace{\nabla\cdot(\rho\phi\mathbf{u})}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\nabla\cdot(\Gamma\nabla\phi)}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{termo fonte}} \quad . \quad (3.3)$$

Utilizando o método dos volumes finitos a equação diferencial requer a integração sobre os volume de controlo Vc, tal que,

$$\int_{V_c}\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)dV + \int_{V_c}\nabla\cdot(\rho\phi\mathbf{u})\,dV = \int_{Vc}\nabla\cdot(\Gamma_\phi\nabla\phi)\,dV + \int_{V_c}S_\phi dV. \quad (3.4)$$

Esta é a equação que é resolvida. Sendo discretizada de forma a produzir um sistema de equações algébricas. E para as resolver precisamos de esquemas de discretização que serão detalhados mais à frente para cada um dos termos.
Sabendo que o Teorema de Gauss é dado por,

$$\int_{Vc}(\nabla\cdot\mathbf{U})\,dV = \oint_{Sc}(\hat{n}\cdot\mathbf{U})\,dS = \oint_{Sc}\mathbf{U}\cdot d\boldsymbol{S}, \quad (3.5)$$

onde S é a superfície delimitadora e $\hat{n}$ é o vetor unitário para fora da superfície de controlo. Substituir os integrais de volume dos termos de convecção e difusão por integrais de superfície na equação 3.4, obtemos,

$$\int_{Vc}\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)\,dV + \oint_{Sc}(\rho\phi\mathbf{U})\cdot d\boldsymbol{S} = \oint_{Sc}(\Gamma_\phi\nabla\phi)\cdot d\boldsymbol{S} + \int_{Vc}S_\phi dV. \quad (3.6)$$

Estes termos podem ser reordenados na forma de termos volumétricos e de superfície tal que,

$$\int_{Vc}\left(\frac{\partial\rho\phi}{\partial t} - S_\phi\right)dV = \oint_{Sc}(\Gamma_\phi\nabla\phi - \rho\phi\mathbf{U})\cdot d\boldsymbol{S}. \quad (3.7)$$

Uma vez que pretendemos uma solução transiente do escoamento é necessário integrar também em ordem ao tempo,

$$\int_t^{t+\Delta t}\left[\int_{Vc}\left(\frac{\partial \rho\phi}{\partial t}-S_\phi\right)dV\right]dt \;=\int_t^{t+\Delta t}\left[\oint_{Sc}(\Gamma_\phi\nabla\phi-\rho\phi\mathbf{u})\cdot d\boldsymbol{S}\right]dt. \quad (3.8)$$

A discretização da integração do termo fonte é expressa como,

$$\int_{Vc} S_\phi dV=\sum_{ip\sim ip(Vc)}(S_{\phi,ip}\omega_{ip}V)=S_{\phi,c}V_c. \quad (3.9)$$

Resultando por fim na equação,

$$\int_{V_c}\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)\,dV+\sum_{f\sim nb(c)}(\rho\phi\boldsymbol{u}-\Gamma_\phi\nabla\phi)_f\,\boldsymbol{S}_f=S_{\phi,c}V_c. \quad (3.10)$$

Cada um dos termos tem a sua própria forma discretizada, e podemos sumariá-las de seguida.

- Discretização do termo convectivo

  Para uma variável escalar ϕ e um campo vetorial $\mathbf{u}$ o termo convectivo é discretizado como,

$$\begin{aligned}(\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\phi))_p&=\frac{1}{V_p}\int_{Vp}\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\phi)dV\\&\approx\frac{1}{V_p}\sum_f\mathbf{S_f}\cdot(\rho\mathbf{u}\phi)_f=\frac{1}{V_p}\sum_f\mathbf{S_f}\cdot(\rho\mathbf{u})_f\phi_f.\end{aligned} \quad (3.11)$$

- Discretização do termo difusivo

  Assumindo que os gradientes nas faces se mantêm constantes devido à variação linear de ϕ temos,

$$\begin{aligned}\nabla\cdot(\Gamma\nabla\phi)&=\frac{1}{V_p}\int_{V_P}\nabla\cdot(\rho\Gamma\nabla\phi)dV\\&\approx\frac{1}{V_P}\sum_f\mathbf{S_f}\cdot(\rho\Gamma\nabla\phi)_f=\frac{1}{V_P}\sum_f(\rho\Gamma)_f\mathbf{S_f}\cdot(\nabla_n\phi_f).\end{aligned} \quad (3.12)$$

  onde $\nabla_n\phi_f$ é o gradiente normal à face.

- Discretização do operador gradiente

  Para qualquer escalar ou vetor ψ, o gradiente sobre um volume de controlo Vc é dado por,

$$(\nabla\psi)_P = \frac{1}{V_p}\int_{Vc}\nabla\psi \mathrm{d}V = \frac{1}{V_p}\int_{\partial V_p}\mathrm{d}\boldsymbol{S}\psi \approx \frac{1}{V_p}\sum_f \mathbf{S}_f\psi_f. \quad (3.13)$$

- Discretização do operador divergência

  Para qualquer vetor ou tensor ψ, o gradiente através de um volume de controlo Vc é dado por ,

$$(\nabla\cdot\psi)_P \int_{V_\mathrm{P}}\nabla\cdot\psi \mathrm{d}V_\mathrm{P} = \int_{\partial V_\mathrm{P}}\mathrm{d}\mathbf{S}\cdot\psi \approx \sum_f \mathbf{S}_f\cdot\psi_f. \quad (3.14)$$

3.2.3 Discretização e estabilidade temporal

Para problemas transientes é necessário integrar a derivada temporal nos volumes de controlo. O esquema de Euler implícito (Forward Euler Scheme) é um esquema de diferenças temporais com precisão de primeira ordem no tempo. Os esquemas de primeira ordem são muito estáveis e utilizam dois pontos para o cálculo. Assumindo que a propriedade ϕ tem uma variação linear, e para uma massa específica constante ρ, a integração da derivada no tempo, desde o passo de tempo n até $n+1$, é dada,

$$\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t} \approx \left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_{n+1}, \quad (3.15)$$

onde o índice n representa o valor do passo de tempo anterior.
Este esquema pode ser melhorado adicionando mais pontos de cálculo, por exemplo, se considerarmos uma função ponderada γ, dada por,

$$\gamma = \frac{1}{co+1}, \quad (3.16)$$

onde co é um coeficiente que pode assumir valores entre 0 e 1, ou seja, um fator de mistura. A Equação 3.15 para esta função ponderada fica então,

$$\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t} \approx \gamma\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_{n+1} + (1-\gamma)\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_{n}. \quad (3.17)$$

Se o co for igual a 1, o esquema é conhecido como Esquema de Crank-Nicolson , que fornece uma representação mais precisa do termo transiente, uma vez que se torna um esquema de segunda ordem. Além disso, se o co for igual a 0, este raciocínio dá origem ao conhecido esquema implícito de Euler de primeira ordem. No entanto, e para um co igual a um é comum ocorrerem instabilidades numéricas, por essa razão o coeficiente é fixado entre valores de 0,5 e 0,9. Esta diminuição tem como consequência afetar a or-

dem de precisão. Deste ponto de vista, e quando se utiliza este esquema, deve ser feito um compromisso entre a difusão numérica (criada pela diminuição da ordem numérica de integração no tempo) e a estabilidade numérica.
Independentemente do esquema temporal utilizado para discretizar as derivadas no tempo, a definição do passo de tempo é muito importante este tipo de para escoamentos transientes. Dependendo do tipo de escoamento, e do caso em estudo, existem diferentes critérios que dão o passo de tempo mínimo para uma boa precisão dos resultados. Um critério que deve ser respeitado é a condição de Courant que, para um caso unidimensional, se define como,

$$\frac{||\mathbf{u}||}{\Delta x}\Delta t \leq C_{\max}, \quad (3.18)$$

onde $C_{\max}$ é o valor máximo permitido pelo tipo de esquema utilizado para resolver a equação discretizada. Um $C_{\max} = 1$ corresponde a uma partícula de fluido que se move através de uma célula num passo de tempo, pelo que a sua relevância para a convergência da solução talvez não seja surpreendente. Os esquemas explícitos são mais sensíveis a esta condição do que os esquemas implícitos pelo que, nos esquemas explícitos o valor máximo é geralmente igual ou inferior a um. No entanto, como a equação de transporte se refere ao regime transiente, o tempo de relaxação elétrica é importante para a precisão dos resultados. O tempo de relaxação elétrica, que é definido por $t_e = \varepsilon/\sigma$, introduz uma restrição de passo de tempo. Assim, é necessário definir o intervalo de tempo mínimo entre estas duas condições. Por esta razão o passo de tempo é definido de forma adaptativa de acordo com,

$$\Delta t = F_s \min\left[\min\left\{\frac{\varepsilon_1}{\sigma_1}, \frac{\varepsilon_2}{\sigma_2}\right\}, C_{\max}\frac{\Delta x}{\|\mathbf{U}\|}\right], \quad (3.19)$$

onde, F_s é um fator de segurança que foi fixado em 0,9 e o $C_{\max}$ é 0,1. Para soluções explícitas o limite de convergência para uma boa precisão temporal requer que o $C_{\max} \in]0; 0.25]$.

3.2.4 Condições de Fronteira

Nas fronteiras do domínio de cálculo são prescritos os valores nas faces têm de ser prescritos e estes têm de ser tratados de forma especial. Nos limites do domínio computacional devem ser aplicadas restrições às variáveis que estão a ser resolvidas as quais são conhecidas como condições de fronteira (BC). A definição das condições de fronteira é desafiante porque: têm de refletir a realidade física do caso a ser simulado; têm de assegurar que o caso de teste é bem imposto, i.e., que irá dar origem a uma solução única, estável e fisicamente real e têm de ser compatíveis com todas as equações que têm de ser resolvidas, visto que é utilizado um algoritmo segregado.
Representemos agora uma célula de cálculo com a respetiva face de fronteira, como na Figura 3.3. Como vemos no esquema não temos um volume de controlo vizinho ao centróide

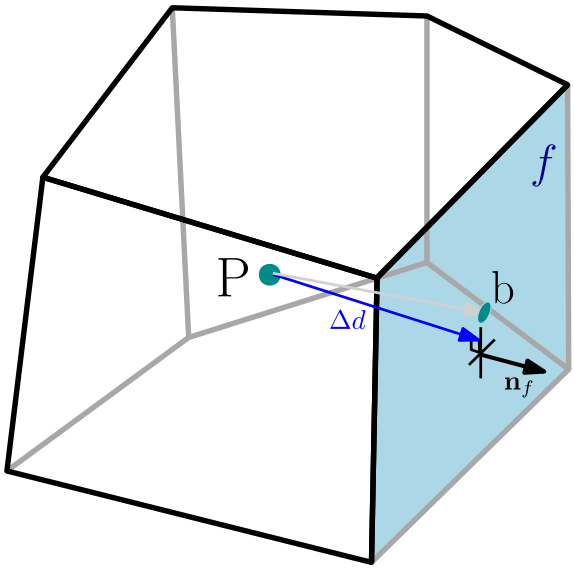


Figura 3.3: Representação de uma célula de calculo na fronteira.

P.
A forma geral das condições de fronteira na fronteira b é dada por,

$$\beta\phi_b + (1-\beta)(\nabla\phi)_b = \Psi_b, \quad (3.20)$$

onde Φ_b é o valor prescrito. Para um valor de $\beta = 0$ as condições de fronteira são de gradiente imposto, conhecidas como condições de *Neumann*, para um valor de $\beta = 1$ a condição de fronteira corresponde à de um valor prescrito fixo, conhecida como condição de *Dirichlet*.
O valor na face da fronteira é dado por,

$$\Psi_f = \Psi_P + \frac{\nabla_{\mathbf{n}}\Psi_b}{C_\Delta}. \quad (3.21)$$

O coeficiente C_Δ é definido através da distância normal ao centróide P no centro da face da fronteira f, tal que,

$$\Delta\mathbf{d} = \mathbf{n}_f\left(\mathbf{n}_f \cdot (C_f - C_P)\right), \quad (3.22)$$

onde C_f e C_P são o centro da face e do centróide de P, respetivamente. Com esta distância normal à face da fronteira o coeficiente $C_\Delta = 1/|\Delta\mathbf{d}|$.
Para todos os casos de teste a densidade de carga e a fração de volume na fronteira são sempre especificados como uma condição de fronteira de Neumann, neste caso com o gradiente igual a zero. Nas paredes a velocidade é aplicada por uma condição do tipo de Dirichelet, com velocidade igual a zero, uma vez que estamos a supor que o escoamento está em regime laminar, para as restantes fronteiras é aplicada a mesma condição que

para a densidade de carga e fração de volume. Uma condição de fronteira atmosférica é definida como do tipo de Dirichelt impondo uma pressão total igual a zero.

3.3 Tratamento da Interface (superfície livre)

Um escoamento num sistema bifásico, com propriedades elétricas importantes, pode ser genericamente classificado como dielétrico-dielétrico, dielétrico-condutor ou de condutor-condutor, isto com base na condutividade elétrica e permissividade dos fluidos envolvidos. A utilização numa simulação de qualquer uma destas diferentes abordagens decorre de se incorporar a condutividade elétrica e a permissividade de ambas as fases nas equações que as regem, no nosso modelo completo do dielétrico com fugas baseado em Melcher-Taylor [96].
Os dois fluidos são aqui considerados imiscíveis, pelo que o domínio de cada uma pode ser bem definido. A Figura 3.4 representa uma configuração padrão de formação de um jato acionado eletricamente. Nesta representação o sistema é composto por dois domínios: o domínio Ω_1 representa a fase líquida e o domínio Ω_2 a fase de ar.

3.3.1 Método do Volume de Fluido (VoF)

O método do Volume de Fluido (VoF) tem como vantagem peculiar o facto de ser utilizado apenas com um único conjunto de equações para ambas as fases do escoamento, porque utiliza uma única variável de estado. Vamos supor que o sistema de fluido bifásico preenche todo o domínio computacional $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$, de forma que duas fases $\Omega_{\{1,2\}} \subset \mathbb{R}^2$ separadas por uma espessura $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ que representa a interface entre os fluidos, tal que,

$$\Omega_0 = \Omega_1(t) \cup \Omega_2(t) \cup \Sigma(t). \quad (3.23)$$

A variável de estado α representa a fração da fase do escoamento e é definida por,.

$$\alpha(t) = \begin{cases} 1 & \text{em } \Omega_1(t), \\ 0 & \text{em } \Omega_2(t), \\ ]0,1[& \text{em } \Sigma(t). \end{cases} \quad (3.24)$$

A fração de volume é uma função escalar limitada entre zero e um e é uma caraterística fundamental do método VoF para escoamentos multifásicos. Na Figura é possível observar através de um olhar mais atento a representação deste princípio de funcionamento. O líquido tem um valor de 1, o ar tem um valor de 0 e a interface é limitada entre 0 e 1.
O método VOF acrescenta uma equação de governo para o transporte desta fração de volume α, denominada *equação de advecção*, dada por,

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) = 0. \quad (3.25)$$

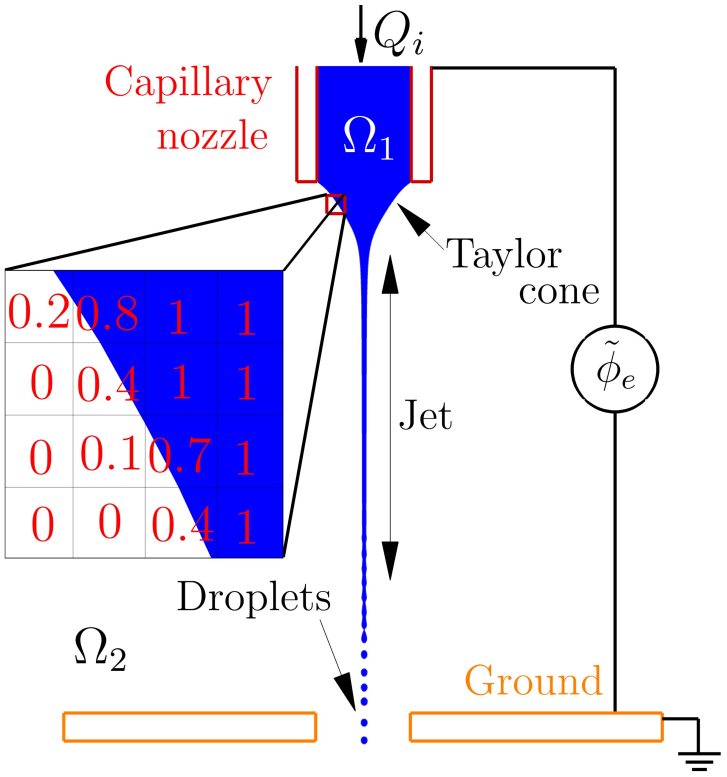


Figura 3.4: Esboço do clássico problema do jato em cone de Taylor e exemplificação do método de Volume de Fluido (VoF) utilizado. O líquido no interior do capilar é conduzido por um campo elétrico externo constante. Os valores da fração de fase são representativos.

A mesma equação resolve ambas as fases e, no final, a soma da fração de volume é igual a 1 [97]. O principal inconveniente do método VOF é o facto de a superfície da água ficar espalhada. Sem qualquer método adicional de captura da superfície esta será representada como uma região que muda gradualmente de 1 para 0. As células que contêm frações volumétricas de ambas as fases não terão uma superfície nítida que as separe no interior da célula, em vez disso, toda a célula será preenchida com uma mistura uniforme das duas fases. Têm sido desenvolvidos diversos esquemas para implementar ao método VoF de forma a obter interfaces com maior precisão. No nosso trabalho utilizamos dois esquemas, sendo estes o esquema MULES (Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solutions) e o isoAdvector, cujas diferenças serão apresentadas seguidamente, secção 3.3.2 e 3.3.3, respetivamente.

3.3.2 Método de compressão puramente algébrico

O esquema MULES (Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solutions) é um esquema numérico em que o termo de convecção é modificado para comprimir a superfície e, assim, reduzir o espalhamento da interface [98]. Este esquema é puramente algébrico e é baseado numa correção do fluxo que é transportado na interface (*flux corrected transport* - FCT) Boris e Book [99]. O método foi melhorado pelos autores e a versão atualmente utilizada é a baseada na formulação de Zalesak [100].
Em primeiro lugar, e reescrevendo a equação da convecção na forma integral obtemos

que,

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial \alpha}{\partial t} dV + \int_{\partial \Omega_i} \alpha \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} dS = 0, \quad (3.26)$$

em que Ω_i representa cada célula, $\partial \Omega_i$ é o limite da célula e $\boldsymbol{n}$ é a normal ao centroíde da célula. A equação é então discretizada, utilizando um qualquer esquema discretização temporal para o primeiro termo e escrevendo o segundo termo como uma soma sobre cada face da célula,

$$\frac{\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{f \in \partial \Omega_i} \left(F_u + \lambda_M F_c \right)^n, \quad (3.27)$$

em que F_u e F_c são os fluxos convectivos e λ_M é o delimitador que toma o valor 1 à superfície e 0 noutros locais. Estes fluxos convectivos são expressos como,

$$F_u = \Phi_f \alpha_{f,\,\text{upwind}} \quad (3.28)$$

e,

$$F_c = \Phi_f \alpha_f + \Phi_{rf} \alpha_{rf} (1 - \alpha)_{rf} - F_u, \quad (3.29)$$

em que Φ_f é o fluxo volumétrico na face. O sobrescrito f denota que a quantidade é avaliada como na face, já o *upwind* significa que é utilizado um esquema de fluxo ascendente e, por outro lado, as variáveis com o subscrito rf são dadas a seguir. Φ_{rf} é dado por,

$$\Phi_{rf} = \min \left(C_\alpha \frac{|\Phi_f|}{|\boldsymbol{S}_f|}, \max \left[\frac{|\Phi_f|}{|\boldsymbol{S}_f|} \right] \right) (\boldsymbol{n}_f \cdot \boldsymbol{S}_f), \quad (3.30)$$

em que C_α é, segundo a literatura, um parâmetro especificado pelo que reduz a dispersão da interface, $\boldsymbol{S}_f$ é um vetor da área da face da célula e $\boldsymbol{n}_f$ é o vetor normal na interface, e centrado na face. Considerando que α_{rf} é dado por,

$$\alpha_{rf} = \alpha_P + \frac{\alpha_N - \alpha_P}{2} \left[1 - \chi \left(\Phi_f \right) \left(1 - \lambda_{\alpha r} \right) \right], \quad (3.31)$$

em que *N* e *P* P denota o vizinho a barlavento e a sotavento, respetivamente, $\lambda_{\alpha r}$ é um limitador e χ é uma função degrau que assume o valor 1 quando o fluxo volumétrico da face é positivo e -1 quando é negativo.
Já $\lambda_M = 0$ quando está longe da interface, e a expressão dentro do somatório na Equação 3.27 reduz-se a F_u, que usa um esquema simples *upwind* para o termo de convecção. E quando $\lambda_M = 1$ está na interface, e a expressão dentro do somatório torna-se uma

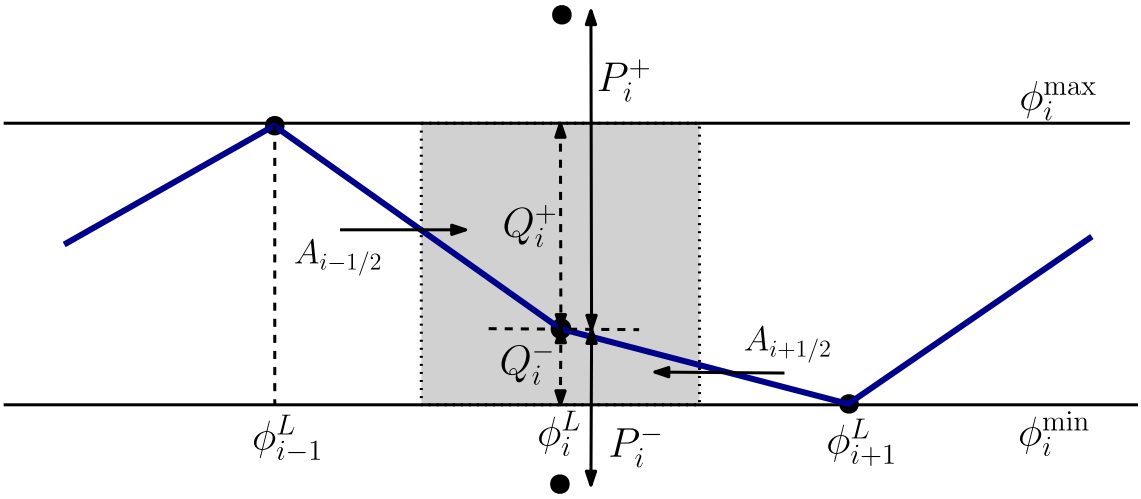


Figura 3.5: Visualização da compressão (1D) da interface com o esquema MULES através do cálculo do fluxo na célula i.

combinação de um esquema de ordem elevada para a convecção representada pelo termo $\Phi_f \alpha_f$ e um termo de fluxo compressivo representado pelo termo $\Phi_{rf}\alpha_{rf}(1-\alpha)_{rf}$. Este esquema de ordem elevada proporciona a modelação da convecçãp de forma mais precisa à superfície e o termo de fluxo de compressão reduz a espessura da superfície. Ao mesmo tempo, o esforço computacional é reduzido fora da superfície. A difusão numérica nesta interface é também reduzida.
Considere-se o esquema da Figura 3.7 que ilustra as diversas variáveis do cálculo do limitador MULES. Os vários passos para o cálculo na interface com o esquema limitador MULES são agora descritos.

1. Calcular os extremos locais definos por,

   $\phi_i^a = \max\left(\phi_i^n, \phi_{i,N}^n\right)$
   $\phi_i^b = \min\left(\phi_i^n, \phi_{i,N}^n\right)$

   onde $\phi_{i,N}^n$ são todos os vizinhos da face da célula de interesse i. Adicionalmente os fluxos de entrada e saída de cada célula têm de ser calculados a partir dos dois fluxos antidifusivos mais afastados do ponto da célula i, tal que,

   $P^+ = -\sum_f \mathrm{A}_f^-$ e $P^- = \sum_f \mathrm{A}_f^+$, onde os fluxos de entrada e saída são respetivamente A_f^- e A_f^+.

2. Corrigir os extremos locais através de limitadores prescritos para o cálculo, $\phi^{\max G}$ e $\phi^{\min G}$, tal que,

   $\phi_i^a = \min\left(\phi^{\max G}, \phi_i^a\right)$
   $\phi_i^b = \max\left(\phi^{\min G}, \phi_i^b\right)$

3. Calcular a quantidade $Q^{\pm}{}_i$, definida por,

   $Q^+{}_i = \frac{V}{\Delta t}\left(\phi_i{}^a - \phi_i{}^n\right) + \sum_f \mathrm{F}^L{}_f$
   $Q^-{}_i = \frac{V}{\Delta t}\left(\phi_i{}^n - \phi_i{}^b\right) - \sum_f \mathrm{F}_f^L$

4. Definir $\lambda_f^{\nu=1} = 1$ para todas as faces e calcular o valor final de $\lambda'_f S$ tal que,

$$\lambda^{\mp,\nu+1}{}_i = \max\left[\min\left(\frac{\pm\sum_f \lambda_f^\nu \mathrm{A}_f^\pm + Q^\pm{}_i}{P^\pm{}_i}, 1\right), 0\right]$$

$$\lambda_f^{\nu+1} = \begin{cases} \min\{\lambda_P+, \nu+1, \lambda_N-, \nu+1\}, & \text{if } A_{i+1/2} \geqslant 0 \\ \min\{\lambda_P-, \nu+1, \lambda_N+, \nu+1\}, & \text{if } A_{i+1/2} < 0 \end{cases}$$

onde λ_P e λ_N representam os λ's os donos e vizinhos da célula para uma dada face f, respetivamente.

3.3.3 Método de compressão com contribuição geométrica

Um método um pouco mais avançado é o isoAdvector. O método isoAdvector usa o conceito de isosuperfícies para calcular fluxos da interface mais precisos para as células que contêm a interface [101, 102]. O valor da fração de fase na célula i no tempo t, $\alpha_i(t)$, é calculado a partir de uma função $H(\boldsymbol{x},t)$ que descreve o campo contínuo da fração de fase

$$\alpha_i = \frac{1}{V_i}\int_{\Omega_i} H(\boldsymbol{x},t)dV, \quad (3.32)$$

onde,

$$H(\mathbf{x},t) \equiv \frac{\rho(\mathbf{x},t) - \rho_{\Omega_2}}{\rho_{\Omega_1} - \rho_{\Omega_2}}, \quad (3.33)$$

em que V_i é o volume da célula i e Ω_i representa cada célula. Conhecendo a fração de volume em cada célula no tempo t, pretende-se calcular as frações de fase no passo de tempo seguinte utilizando a seguinte equação, em que o fluxo de α em cada face da célula é integrado no tempo e somado. Desta forma,

$$\alpha_i(t+\Delta t) = \alpha_i(t) - \frac{1}{V_i}\sum_{j\in B_i} s_{ij}\int_t^{t+\Delta t}\int_{F_j} H(\boldsymbol{x},\tau)\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\tau)d\boldsymbol{S}d\tau, \quad (3.34)$$

em que B_i é a lista de todas as faces F_j pertencentes à célula i, s_{ij} é utilizado para orientar o fluxo para fora da célula e $\mathcal{T}$ é a variável de integração utilizada no passo de tempo. $d\boldsymbol{S}$ é uma área elementar orientada por um vetor que aponta para fora do volume. s_{ij} é +1 ou -1 para garantir que o produto $s_{ij}d\boldsymbol{S}$ está sempre na direção para fora do limite da célula, mesmo quando a orientação da face j faz com que $d\boldsymbol{S}$ aponte para dentro da célula. Os integrais dentro do somatório podem ser substituídos por $\Delta V_j(t,\Delta t)$, que descreve o volume total de fluido A transportado através da face j durante um passo de tempo,

$$\Delta V_j(t,\Delta t) = \int_t^{t+\Delta t}\int_{F_j} H(\boldsymbol{x},\tau)\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\tau)d\boldsymbol{S}d\tau. \quad (3.35)$$

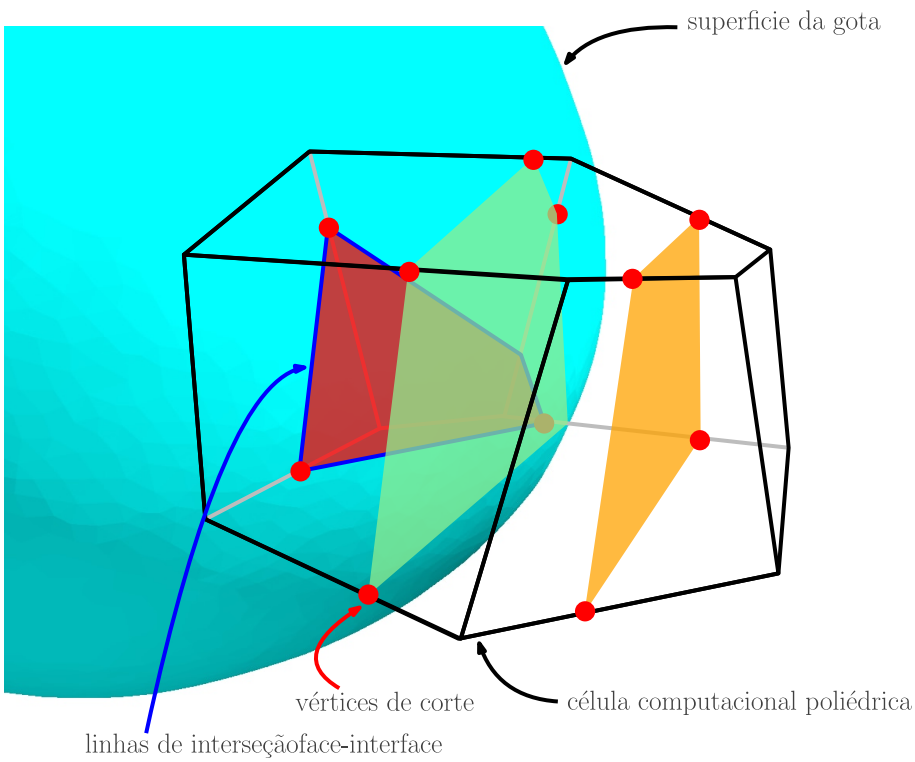


Figura 3.6: Esquema ilustrativo do corte feito pelo esquema *isoAdvector* numa célula computacional poliédrica, bem como a propagação da *isoface* estimada pela velocidade envolvente em três diferentes tempos de cálculo para um único passo de tempo.

Esta é a quantidade que é estimada no método isoAdvector. É calculada utilizando as quantidades α_i, u_i e Φ_j que são conhecidas no tempo t, em que Φ_j é o fluxo da face através da face j.

$$\Phi_j(t) = \int_{F_j} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{S}. \quad (3.36)$$

Em mais detalhe os passos do algoritmo do esquema geométrico isoAdvector são descritos em [101]. O que é importante reter é que este método utiliza o movimento de isosuperfícies. Considere-se-se o esquema da Figura 3.6, a superficial inicial, representada a vermelho, é uma *isosurface* no interior da célula com um *isovalue* tal que corte a célula nas frações volumétricas corretas, $\alpha_i(t)$ e $1 - \alpha_i(t)$. A face é definida através das linhas de interseção da face com o isovalor através de interpolação linear.

Em seguida, o movimento da isosuperfície durante um passo de tempo é estimado utilizando os dados do campo de velocidades durante o intervalo de tempo $[t, t + \Delta t]$. A velocidade da célula $\boldsymbol{u}_i$ é então interpolada para $\boldsymbol{x}_s$, que é o centro da isosuperfície e $\boldsymbol{n}_s$ o seu vetor normal, o que resulta no vetor de velocidade $\boldsymbol{u}_s$.

$$\boldsymbol{u}_s = \boldsymbol{u}_s \cdot \boldsymbol{n}_s \quad (3.37)$$

Na mesma medida que o MULES, este também tem um procedimento de delimitação para garantir que os valores de α permanecem no intervalo de 0 a 1. Onde para cada célula com $\alpha_i(t + \Delta t) < 0$ ou $\alpha_i(t + \Delta t) > 1$ são ajustados os valores de $\Delta V_j s$ das faces utilizando um procedimento de redistribuição. A redistribuição é efetuada para garantir a conservação do volume.

3.3.4 Tensão superficial

Como anteriormente discutido, a equação de Young-Laplace para a tensão superficial é uma função da curvatura da interface. Tipicamente a curvatura κ é dada por,

$$\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) \approx \kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}_\alpha, \quad (3.38)$$

onde $\mathbf{n}_\alpha$ é o vetor normal à interface discreta, neste caso calculado através do gradiente,

$$\mathbf{n}_\alpha = -\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|}. \quad (3.39)$$

A tensão superficial $\boldsymbol{f}_\gamma$ é determinada usando o modelo de Força Contínua de Superfície (CSF), inicialmente desenvolvido por Brackbill [103]. A tensão superficial no modelo CSF é apresentada como uma força volumétrica calculada como,

$$\boldsymbol{f}_\gamma = \gamma \kappa (\nabla \alpha), \quad (3.40)$$

Desta forma a densidade de força de superfície torna-se uma densidade de força de volume, e atua apenas na transição formada pela interface difusa. No limite da dimensão caraterística da malha computacional, próxima de 0, o modelo CSF assegura que a densidade de força superficial é representada de forma correta. A tensão superficial na interface gera um gradiente de pressão adicional, resultando numa força avaliada por unidade de volume. Como o termo de compressão de superfície é apenas aplicado na interface a convecção dos campos de fluido individuais, de casa fase, não é afetada.

3.3.5 Ângulo de contacto

Por vezes as paredes requerem uma atenção especial relativamente ao ângulo de contacto da fase líquida com a parede. Veja-se a Figura 3.7 onde vemos as gotas de um eletrospray a serem depositadas na parede do coletor. O modelo do ângulo de contacto é implementado como uma condição nas fronteiras utilizando a fração de volume α.
A utilização do modelo do ângulo de contacto modifica o campo da fração de volume na fronteira, permitindo-lhe mudar independentemente da imposição de uma condição de fronteira de não-deslizamento. A condição de fronteira de não-deslizamento é, por-

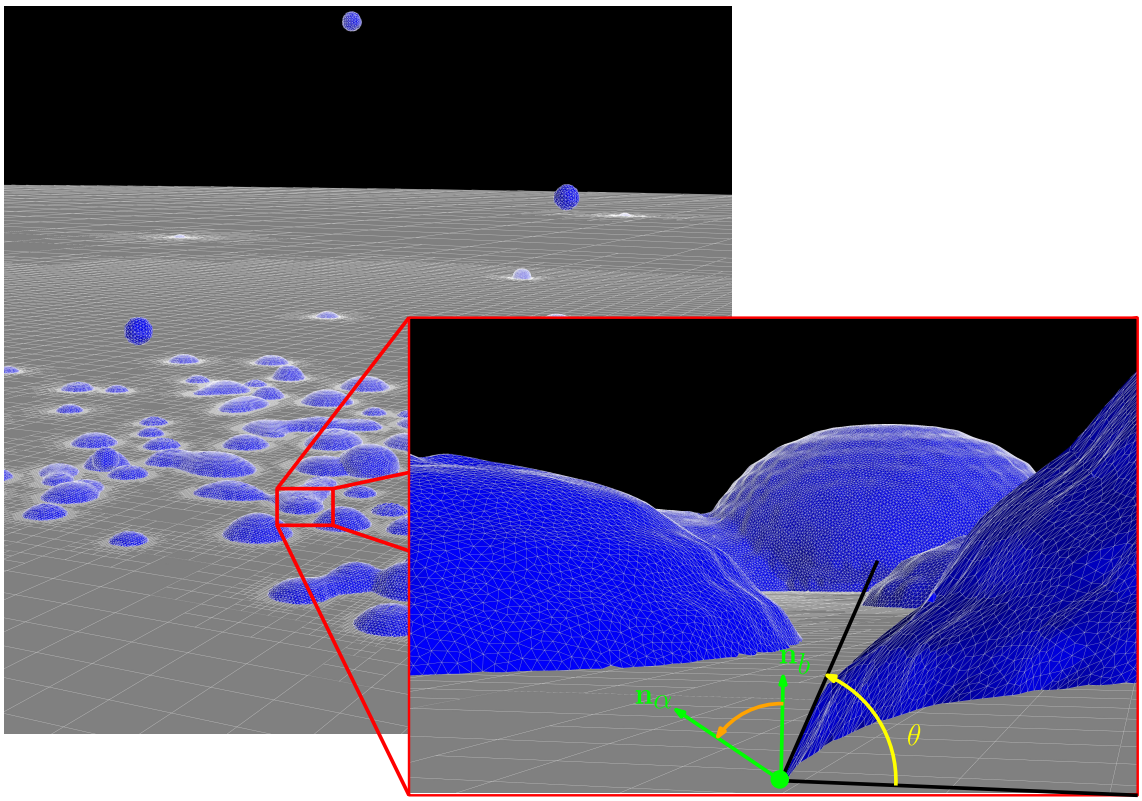


Figura 3.7: Visualização da deposição de gotas líquidas no coletor de um *electropray*. A janela de aproximação mostra os parâmetros utilizados na consideração do ângulo de contacto do líquido com a superfície, sendo θ o ângulo de contacto prescrito, $\mathbf{n}_b$ o vetor normal à fronteira (neste caso a parede do coletor) e $\mathbf{n}_\alpha$ o vetor normal à interface VoF no ponto de contacto com a parede.

tanto, implicitamente relaxada na fronteira, removendo assim a singularidade que de outra forma ocorreria na linha de contacto.
A orientação de $\nabla\alpha$ é corrigida para atingir o valor do ângulo de contacto prescrito em relação à superfície sólida. O valor do ângulo de contacto prescrito é alcançado quando na fronteira este é,

$$\mathbf{n}_b \cdot \mathbf{n}_\alpha = \cos(\theta). \quad (3.41)$$

Nas nossas simulações considerámos um ângulo de contacto fixo e constante nos bocais e na parede do coletor. Nas faces de fronteira onde a linha de contacto deve permanecer estática é definida uma condição de fronteira de Dirichlet, forçando o valor de α a permanecer o mesmo para o passo de tempo seguinte.

3.4 Outras considerações numéricas importantes

3.4.1 Refinamento e redistribuição da malha adaptativa

A precisão de uma simulação numérica pode ser aumentada através do aumento uniforme da densidade da malha computacional, contudo isto acontece à custa de um aumento significativo do peso computacional. Uma forma de aliviar o problema do custo computacional é utilizar um refinamento da malha adaptativo para um campo de interesse ou apenas nas regiões onde é necessária uma resolução adicional. No caso de escoamentos multifásicos, a superfície livre é normalmente o local onde a resolução da malha deve ser o mais fina possível, porque nesta são usuais os gradientes mais elevados que precisam de serem calculados. Além disso, o raio mínimo das gotículas e fios de líquido que podem ser resolvidos pelo método é limitado pelo tamanho caraterístico da célula na interface. Malhas insuficientemente refinadas resultam em gotículas e fios de líquido artificialmente grandes.
Em particular nos jatos EHD, o tamanho das gotículas geradas é da ordem do micrómetro, muito inferior ao tamanho dos jatos de líquido e muito mais pequeno do que a dimensão do domínio computacional. Para garantir a obtenção de uma resolução numérica suficientemente elevada a malha tem de ser refinada na interface à medida que se desloca. O refinamento dinâmico da malha pode permitir reduzir drasticamente o número de graus de liberdade necessários para resolver a interface, à custa de operações adicionais de refinamento da malha.

3.4.2 Balanço da carga computacional

A paralelização dos cálculos numéricos é um meio típico de reduzir os tempos de simulação. O processamento paralelo pode ser efetuado utilizando uma metodologia conhecida como interface de passagem de mensagens (MPI) para comunicar entre os diferentes processadores [104]. Os dados atribuídos a cada processador são determinados pela decomposição do domínio. Neste caso, a malha computacional é dividida em subdomínios não

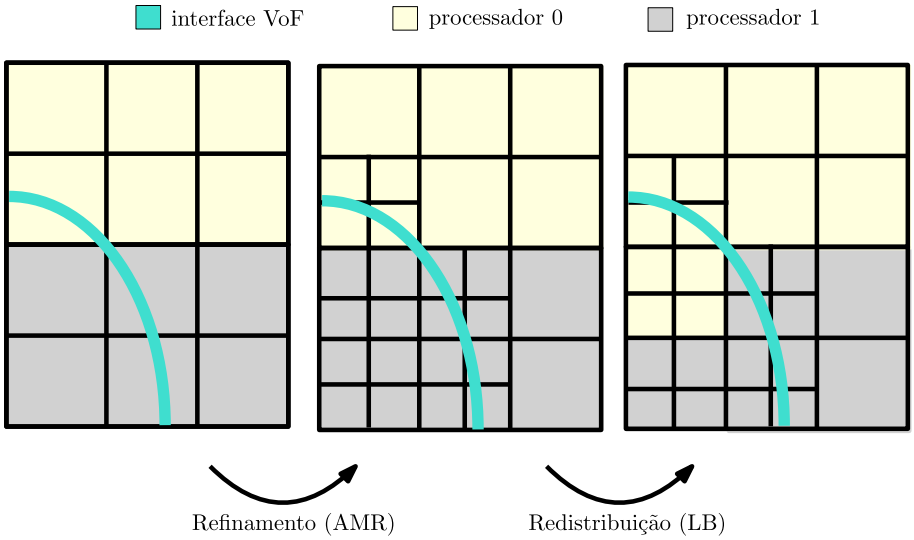


Figura 3.8: Redistribuição da malha para balanceamento da carga após o refinamento. Após o refinamento, as cargas associadas a cada um dos processadores são diferentes. O desequilíbrio é reduzido movendo células entre subdomínios.

sobrepostos, cada um associado a um processador. A comunicação entre os diferentes domínios é efetuada utilizando uma abordagem de camada zero-halo [104].

A decomposição do domínio computacional é, em princípio, inicialmente definida para igualar a carga (número de células da malha) nos diferentes processadores, como consta na Figura 3.8. Uma vez que os subdomínios são definidos espacialmente, o refinamento adaptativo da malha pode aumentar a carga em apenas alguns dos subdomínios. Para os cálculos em que a região refinada percorre o domínio, pode surgir um grande desequilíbrio de carga. Nesse caso, perde-se a eficiência, do cálculo paralelo e o tempo de computação aumenta.

Uma solução para evitar essa perda de eficiência consiste em forçar uma redistribuição dos subdomínios quando o desequilíbrio de carga ultrapassa um limiar. Esta operação é efetuada durante a execução paralela do modelo. O método de "cálculo da carga" é um exemplo de implementação do método, no qual se baseia o procedimento utilizado neste trabalho [105]. Utilizando este método o desempenho paralelo pode ser preservado através do reequilíbrio ocasional dos subdomínios. O procedimento de reequilíbrio é ilustrado na Figura 3.8. Embora dispendiosas, estas operações só têm de ser efetuadas raramente, pelo que o seu custo total ao longo de todo o processo de cálculo é reduzido.

3.4.3 Solução do sistema de equações discretas

As equação de governo na forma discretizadas geram um sistema de equações lineares m, onde m é o número de células no domínio. Assim, resolve-se uma equação $A\phi = \boldsymbol{b}$. A solução deste sistema é conseguida através da utilização de métodos iterativos para equações lineares. Estes métodos iniciam-se com uma estimativa a qual é iterativamente melhorada até que a tolerância de precisão pretendida seja atingida, mais detalhes sobre estes métodos de solução veja-se [93].

3.5 O método de Partícula Discreta

Como anteriormente referido existe outro método que também pode ser usado para a simulação de eletrosprays [38, 106], ou em escoamentos onde existe a atomização de jatos líquidos. No método a que nos referimos é utilizada uma formulação Euler-Lagrange, onde o ar (ou qualquer outro ambiente fluido) é calculado através da hipótese do meio contínuo do FVM e a fase líquida (gotas) é tratada como partículas discretas. Este método é particularmente útil quando temos gotas muito pequenas comparativamente ao domínio total ($d_d \lll D_f$). Quando estas gotas são consideradas muito pequenas quando as forças de tensão superficial que atuam no voo da gota são muito maiores que as hidrodinâmicas, de tal forma que a gota mantém uma forma esférica e coesa. Este tipo de método requer menos poder computacional visto que a interface da fase líquida não é explicitamente calculada. Este método será utilizado em simulações onde se irá testar a formação de spray através do cone de Taylor, e no qual as gotas mais pequenas são convertidas do método Euler-Euler para Euler-Lagrange, ver secção 4.3 com resultados.

3.5.1 Equações de governo da fase discreta

O método Lagrangiano de seguimento de partículas (LPT) segue o movimento de elementos de fluido Lagrangianos ao longo do domínio computacional. Cada elemento representa um determinado número de gotículas com propriedades idênticas, como sejam o diâmetro e a velocidade. São tratadas como massas pontuais e, portanto, não contêm volume. A posição e a velocidade são atualizadas em cada passo de tempo com base em equações diferenciais definidas para a sua trajetória e quantidade de movimento,

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}_p}{\partial t} = \boldsymbol{u}_p, \quad (3.42)$$

$$m_p \frac{\partial \boldsymbol{u}_p}{\partial t} = \boldsymbol{F}_D + \boldsymbol{F}_G + \boldsymbol{F}_E, \quad (3.43)$$

onde, m_p é a massa da partícula, que tem uma velocidade e posição $\boldsymbol{u}_p$ e $\boldsymbol{x}_p$. Para cada elemento de fluido são consideradas as três forças atuantes. As forças são a de resistência $\boldsymbol{F}_D$, a devida ao campo gravitacional $\boldsymbol{F}_G$ e ainda a devida ao campo eletrostático $\boldsymbol{F}_E$. A força de resistência é devida à aerodinâmica, e é dada por,

$$\boldsymbol{F}_D = C_D \frac{\pi d_p^2}{8} \rho_g (\boldsymbol{u}_g - \boldsymbol{u}_p) |\boldsymbol{u}_g - \boldsymbol{u}_p|. \quad (3.44)$$

Para esta simulação foi utilizado um coeficiente de resistência C_D calculado com o modelo de Schiller-Neumann [107].
A força gravitacional sobre a partícula é ainda computada pela força de impulção na mesma direção e, consequentemente, é possível implementar esta força apenas como,

$$\boldsymbol{F}_G = m_p \boldsymbol{g} \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_p}\right). \quad (3.45)$$

A força elétrica devida ao campo eletrostático é calculada a partir de,

$$\boldsymbol{F}_E = q_p \boldsymbol{E}. \quad (3.46)$$

Para contabilizar a desagregação secundária dos elementos de fluido, devido às forças aerodinâmicas, utilizou-se o modelo de desagregação secundária de Reitz-Diwakar [38, 106], uma vez que as gotículas convertidas serão de pequeno diâmetro, pelo que não se espera uma desagregação estaminal e vibracional. Neste modelo o número de partículas é calculado pela conservação da massa/volume. Uma vez que a temperatura e a pressão são as atmosféricas ambientes, não consideramos a mudança de fase das gotículas para vapor, o que criaria o *Secondary Spray Plume*.

3.5.2 Conversão do domínio contínuo para discreto

A conversão de gotículas líquidas (estrutura Euleriana) para partículas (estrutura Lagrangiana) é feita essencialmente através da identificação das gotículas individuais e, se forem válidas sob determinados critérios impostos, são transferidas para a estrutura LPT. A identificação de gotas singulares é feita através da variável de estado do método VoF, sendo esta o α, veja-se a Figura 3.9.
Como vemos na Figura 3.9, à esquerda temos um corte do espaço contínuo colorido pelo valor da variável α, e para aquele passo de tempo, sendo que é este o campo que é analisado para detetar a presença de gotas singulares.
As gotas individuais tridimensionais no campo da fração de fase α são identificadas utilizando um algoritmo de identificação espacial de componentes ligados (CCL) tridimensional de quatro conectividades no domínio computacional completo. Este algoritmo deteta detetar gotículas num campo de Volume de Fluido (VoF) através de uma matriz binária 3D, em que $V(x, y, z)$ representa a célula na posição (x, y, z), veja-se [108].
As propriedades mais importantes do movimento das gotículas são o diâmetro, a carga elétrica, a posição e a velocidade, carecendo estas de ser adequadamente transportadas da estrutura VoF para o LPT. A massa e o volume são interpolados a partir da massa específica e do diâmetro.
O diâmetro das gotas é calculado pelo equivalente de uma gota esférica com o volume calculado através da soma do volume das parcelas que agregam a gota da seguinte forma,

$$V_p = \sum_i \alpha_i V_i. \quad (3.47)$$

Correspondendo a uma gota com o diâmetro de,

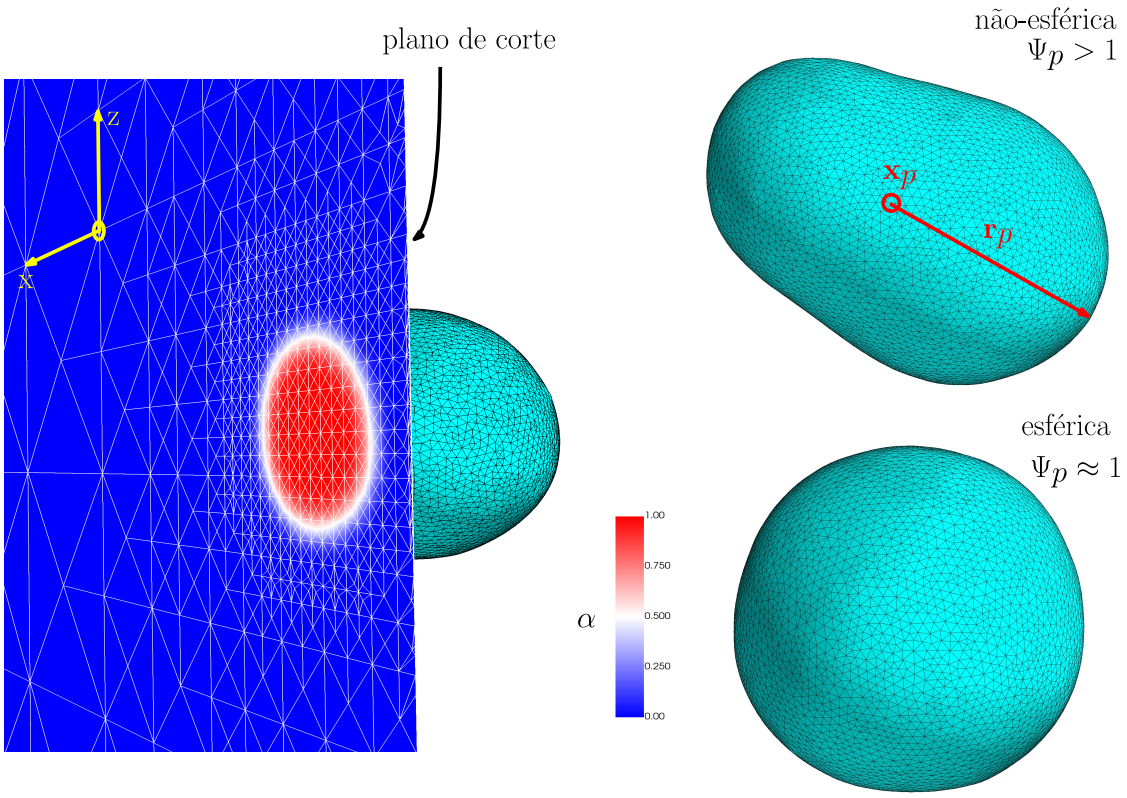


Figura 3.9: (esquerda) Visualização de um plano a cortar uma gota a que voa no domínio de cálculo, colorido pela função α e com as linhas brancas a mostrar a malha computacional. (direita) Demonstração de uma gota não-esférica com uma esfericidade $\Psi_p > 1$ e uma gota esférica $\Psi_p \approx 1$.

$$d_p = \sqrt[3]{\frac{6V_p}{\pi}}. \quad (3.48)$$

A posição e velocidade são dadas, respetivamente, por,

$$\mathbf{x}_p = \frac{1}{V_p} \sum_i \alpha_i V_i \mathbf{x}_i, \quad (3.49)$$

e

$$\mathbf{u}_p = \frac{1}{V_p} \sum_i \alpha_i V_i \mathbf{u}_i. \quad (3.50)$$

A conversão do espaço contínuo para o espaço discreto é feita caso existam três condições sejam características na gota em análise. A primeira condição é que o diâmetro d_p seja inferior a um certo valor prescrito, $d_{\max}$. Garantindo-se que apenas as gotas pequenas do spray sejam convertidas.
A segunda condição é a de esfericidade, definida como Ψ_p, é calculada pelo rácio entre o raio máximo das gotículas (distância máxima da interface ao centro de massa da gotícula) e o diâmetro correspondente d_p.

$$\Psi_p = \frac{2\|\mathbf{r}_p\|_{\max}}{d_p}. \quad (3.51)$$

Isto garante que o modelo não converta as gotículas sob efeitos não esféricos, tais como uma rutura primária. Isto porque, como explicado, o aumento do arrastamento ou a deformação oscilante não podem ser resolvidos com exatidão utilizando elementos de fluido Lagrangianos. Por conseguinte, essas gotículas permanecem na estrutura VoF e não são convertidas.
Um terceira condição relaciona a carga elétrica com o tamanho das gotas. Ao contrário de outros modelos, que têm propriedades de carga elétrica fixas para as partículas do spray, ou usam uma constante de "carga elétrica-massa", o nosso modelo calcula a carga específica de cada elemento de fluido. O cálculo da carga elétrica é baseado na mobilidade eletroforética e assim é calculado de,

$$q_p = 3\pi d_p \mu \mu_E, \quad (3.52)$$

onde, μ_E ($\mathrm{m^2\,V^{-1}\,s^{-1}}$) é a mobilidade eletroforética (ou mobilidade iónica) [109], calculada de $\nu_M/|\boldsymbol{E}|$, onde ν_M ($\mathrm{m\,s^{-1}}$) é a migração eletroforética das partículas. Esta migração eletroforética é assumida como a velocidade da gota no momento da conversão de VoF para LPT.
A carga da partícula ocorre através de mecanismos de carga de campo e de carga por di-

fusão. O carregamento por campo é dominante quando a carga da partícula é inferior à carga de saturação e o carregamento por difusão é dominante quando a carga da partícula é superior ao nível de saturação, embora a sua contribuição seja mínima e, por isso, não tenha sido considerada no nosso caso. A carga de saturação das gotículas é dada por,

$$q_{sat} = \frac{3\varepsilon_r}{\varepsilon_r + 2}\pi\varepsilon_0 d_p^2 \left|\boldsymbol{E}\right|. \quad (3.53)$$

As partículas do campo elétrico são aceleradas em direção aos elétrodos devido à força de Coulomb, que é proporcional à carga elétrica e ao módulo do campo elétrico. Estas partículas têm um nível de saturação da carga elétrica que podem conter. Quando as partículas têm uma carga inferior à carga de saturação q_{sat} continuam a carregar-se, sendo este efeito dominante. Quando a partícula atinge a carga de saturação o efeito dominante é a difusão de carga, da partícula para o meio [110]. No entanto, esta contribuição da difusão para o escoamento do fluido é muito reduzida, pelo que não foi por nós considerada. A carga de saturação é dada pela expressão,

$$q_{\mathrm{p,sat}} = \frac{3\varepsilon_{r,p}}{\varepsilon_{r,p} + 2}\pi\varepsilon_0 d_p^2 |\boldsymbol{E}|. \quad (3.54)$$

No nosso modelo impomos que a carga elétrica das partículas seja $q \leq q_{sat}$. Contundo existe um outro limite que é mais importante manter. Essa condição diz respeito ao facto de que, se a carga da gota for maior do que o chamado limite de Rayleigh, o modo de oscilação ocorre porque a força repulsiva de Coulomb excede a força atrativa de tensão superficial [44]. Este limite de Rayleigh é definido como,

$$q_R = \left(8\pi\varepsilon_0\gamma d_p^3\right)^{1/2}, \quad (3.55)$$

onde ε_0 é a permissividade elétrica do vácuo e γ é a tensão superficial da gota. Se a carga elétrica interpolada para a gota individual, q, for superior a este limite de Rayleigh q_R, a dinâmica das gotas tem de ser resolvida pelo modelo de meio contínuo EHD e não pode ser simplificada para o domínio Lagrangiano. O q_R pode ser simplificado para a expressão em função do volume das gotículas $q_R = (48\varepsilon_0\gamma V_p)^{1/2}$. O acoplamento aerodinâmico é baseado no trabalho de Heinrich [111].

No algoritmo de acoplamento de [111] foi necessário adicionar o acoplamento da carga elétrica, que é uma das principais propriedades da dinâmica das partículas. Neste modelo não se considera a evaporação e a quebra não uniforme das gotículas carregadas, quebra secundária do modelo LPT, devido ao facto de o líquido utilizado para a atomização ter baixa condutividade $O(10^{-6})$ ($\mathrm{S\,m^{-1}}$) [112]. Além disso, quando as partículas das gotículas se partem devido às forças aerodinâmicas, a carga elétrica da gotícula-mãe (q_0) é dividida uniformemente pelas esferas individuais (q_i), respeitando a conservação da carga elétrica de $q_0 = \sum q_i$ [113]. A quebra não uniforme ocorre nas gotículas grandes

com comportamentos vibracionais da carga elétrica e, por isso, é resolvida pelo modelo VoF.

3.5.3 Detalhes numéricos

O algoritmo proposto envolve é a ligação entre o método do volume de fluido, para o seguimento da superfície livre de um escoamento bifásico, e o seguimento Lagrangiano para a formação de gotas muito pequenas. Este procedimento de conversão consiste em várias etapas,

1. Identificar gotículas individuais com base no campo de α.
2. Verificar os critérios de conversão com base no cálculo das suas propriedades.
   (a) Diâmetro, $d_p \leq d_{\max}$,
   $d_p = \sqrt[3]{\frac{6V_p}{\pi}}$.
   (b) Esfericidade, $\Psi_p \leq 2$,
   $\Psi_p = \frac{2\|\mathbf{r}_p\|_{\max}}{d_p}$.
   (c) Carga elétrica, $q_p \leq q_R$,
   $q_R = \left(8\pi\varepsilon_0\gamma d_p^3\right)^{1/2}$.
3. Converter e eliminar (se elegível) as gotículas que satisfizerem os critérios de transformação. Convertem-se injetando elementos de fluido no domínio Lagrangiano e eliminam-se as gotículas de líquido do campo bifásico Euleriano.

Ao converter do espaço contínuo para o discreto a malha computacional anteriormente refinada para a interface VoF é recalculada, de forma a eliminar as células refinadas, como é demonstrado na Figura 3.10. Assim o tamanho da malha computacional é significativamente reduzido.
Para garantir que no momento da conversão de uma gotícula de VoF para uma parcela de LPT a partícula não se encontra em movimento vibracional/transição da carga elétrica, a conversão é feita em intervalos de 100, garantindo que a relaxação elétrica na gota líquida já aconteceu (que será 100 vezes o tempo de relaxação elétrica τ_e).

3.6 Resumo e contribuições inovadoras dos diferentes algoritmos

O trabalho deste capítulo contribuiu para melhorar os algoritmos existentes para o cálculo de escoamentos bifásicos que estavam implementados e extensivamente validados do OpenFOAM, a seguinte lista nomeia as diferentes contribuições.

1. interFoam é o algoritmo original (código fonte do OpenFOAM v1912). Algoritmo resolve as equações de Navier-Stokes para dois fluidos incompreensíveis, imiscíveis e isotérmicos. Utiliza o método de Volume de Fluido com o esquema MULES.

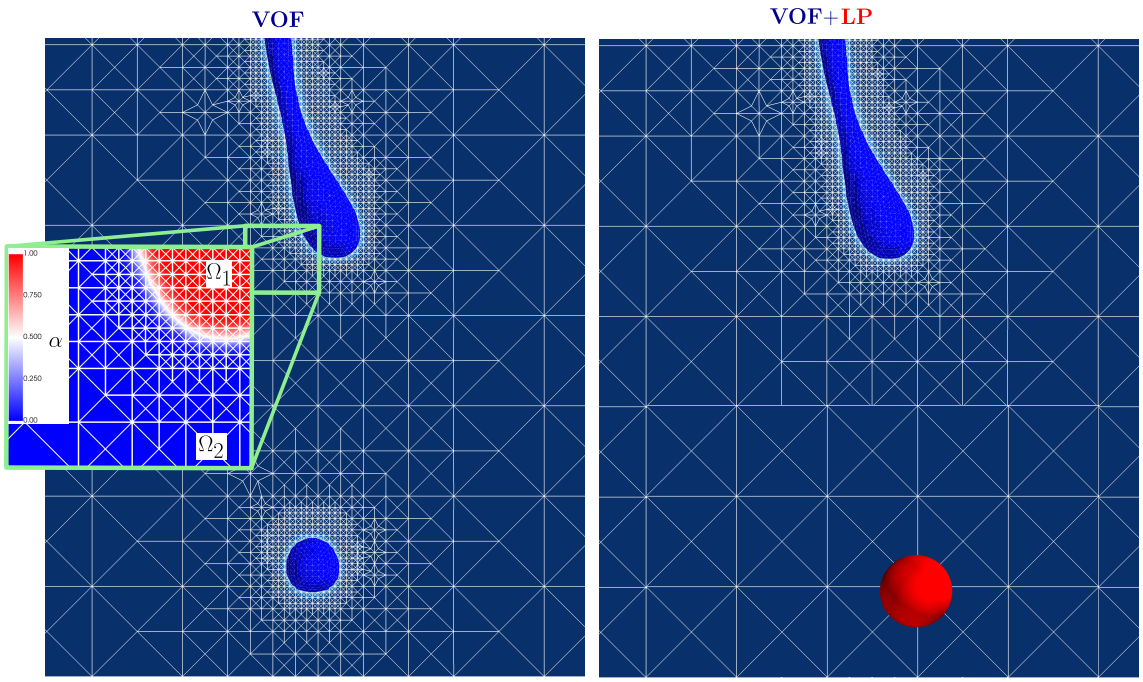


Figura 3.10: Visualização da conversão de uma gota do domínio VoF (Euleriano) para o domínio LPT (Lagrangiano). A malha computacional é recalculada pois o método LPT não tem a interface para refinar.

2. interFoamEHD, No modelo 1. foram implementadas das equações eletrostáticas e a força de Maxwell.

3. interIsoFoamEHD, Foi efetuada a substituição do esquema de compressão da interface MULES do modelo 1. pelo isoAdvector, para maior precisão na interface e capacidade de passos de tempo maiores.

4. atomizationFoamEHD, foi introduzido o acoplamento do método de partícula discreta LPT e os critérios de viabilidade da conversão de gotas muito pequenas do meio contínuo VoF para LPT. Possibilidade de simulação completa de eletrosprays sem necessidade de malhas computacionalmente intensas.

Mostraremos agora o fluxograma dos dois modelos desenvolvidos e implementados que serão utilizados ao longo desta tese, sendo estes, o *interFoamEHD/interIsoFoamEHD* (ver Figura 3.11) e o *atomizationFoamEHD* (ver 3.12). Ambos os modelos utilizam o algoritmo PIMPLE. Este algoritmo é a agregação de um ciclo interno de correção, que é o algoritmo PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators), e um circuito externo de correção, que é o algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations). O acoplamento pressão-velocidade é implementado utilizando o algoritmo PIMPLE, que é um híbrido do algoritmo SIMPLE [92] e PISO [114]. Este algoritmo utiliza um loop de correção interno PISO com um loop de correção externo SIMPLE. O algoritmo PIMPLE mostra uma melhor estabilidade na resolução numérica para valores de maiores passos de tempo ou maior número de Courant em comparação com o PISO. O ciclo corretor interno (PISO) é um corretor de instabilidade na pressão que pode ser acoplado ao circuito corretor externo (SIMPLE), proporcionando um acoplamento pressão-velocidade mais robusto. O número de loops pode ser definido de forma independente. Se o

número de correctores do ciclo exterior for definido como zero, o PIMPLE comportar-se-á como um algoritmo SIMPLE.

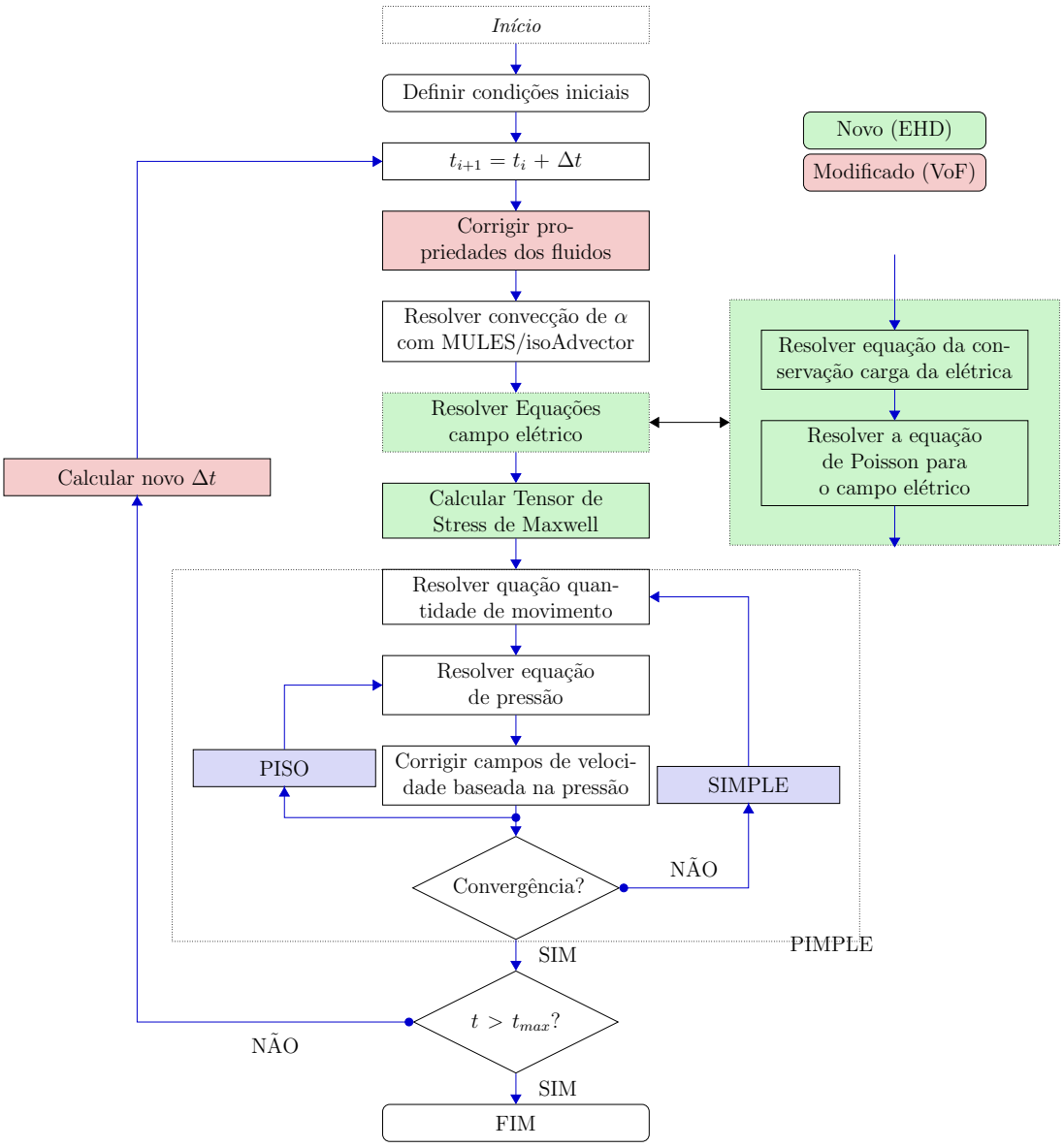


Figura 3.11: Fluxograma do algoritmo de cálculo baseado unicamente na hipótese de meio contínuo, o fluxograma é igual para os nossos modelos interFoamEHD e interISOFoamEHD, a diferença entre os dois é apenas a escolha pelo esquema de compressão da interface VoF. As componentes a verde são as nossas contribuições adicionais ao modelo base e as a vermelho foram componentes modificadas.

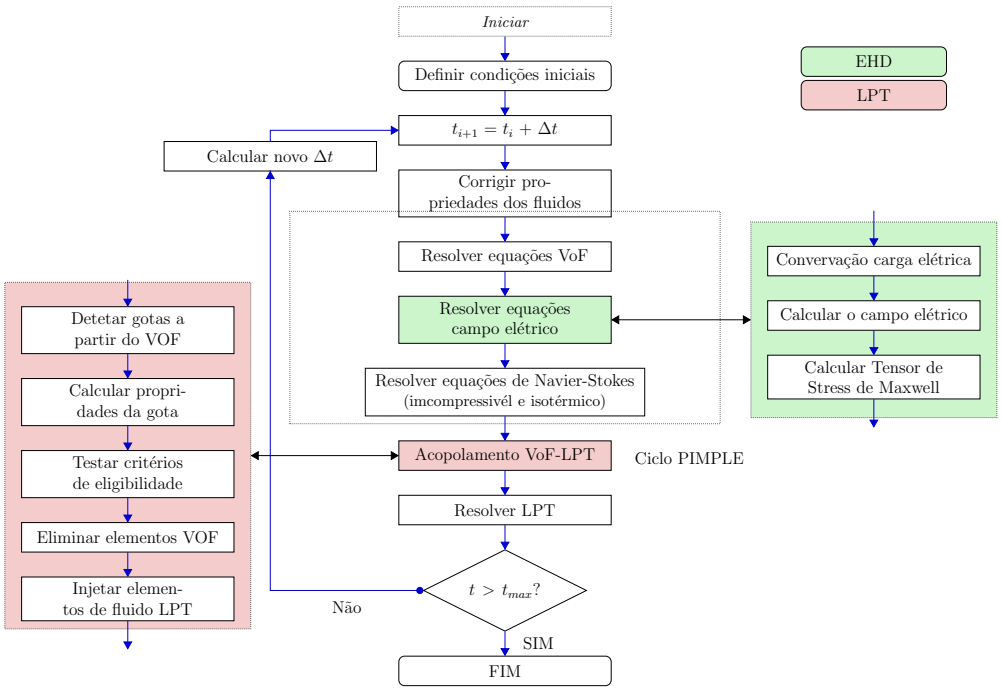


Figura 3.12: Fluxograma do novo algoritmo de cálculo baseado na hipótese de meio contínuo com a conversão das pequenas gotículas para o domino lagrangiano, para que sejam tratadas pela hipótese discreta.

Capítulo 4

Desempenho de Jatos Eletrohidrodinâmicos

Este capítulo apresenta os resultados principais sobre o do desempenho de jatos eletrohidrodinâmicos, o qual inclui estudos de,

- Jatos Axissimétricos para estudo da transição Cone-Jato e instabilidades axiais;
- Um modelo tridimensional para estudo das instabilidades tridimensionais;
- Modelação com malha adaptativa para cálculo da atomização do jato em plumas formadas por gotículas.

4.1 Jatos axissimétricos [1]

4.1.1 Introdução

Os estudos iniciais deste trabalho foram focados em jatos eletrohidrodinâmicos estáveis de formato radial. Isto significa que queremos calcular o escoamento de jatos em cone de Taylor axissimétricos. Este tipo de jato é formado quando as condições de caudal de entrada e o potencial elétrico aplicado estão dentro de uma janela de operação estável, na direção radial, significando que a única instabilidade nestes jatos líquidos com os quais estaremos a lidar deve-se-ia tensão superficial e não ao *bending*. Neste sentido, e quando nos referimos ao caso do *Jato Axissimétrico* estamos a falar da modelação computacional aos testes experimentais de [7], sendo que as condições desses estudos foram replicadas computacionalmente. Este caso foi escolhido pois com ele é possível validar o modelo eletrohidrodinâmico em termos da quebra do jato através da comparação direta com as leis de escala para o diâmetro das gotas geradas. A figura seguinte mostra um jato nestas condições específicas. Um jato axissimétrico tem então a forma característica da Figura 4.1.

A formação mais comum destes jatos axisimétricos encontra-se em sistemas líquido-gás. No entanto há aplicações também em nanofluidos com sistemas líquido-líquido [116]. Por esta razão este modelo computacional é de grande utilidade porque pode funcionar numa vasta gama de condições de operação do sistema. O Apêndice B.2 apresenta uma extensa validação do método de cálculo, demonstrando que o modelo é capaz de lidar com sistemas cc e dc, pelo que é adequado para simular estes jatos. Além disso, como a equação de transporte da densidade de carga elétrica é transiente, o comportamento dinâmico das cargas pode ser analisado explicitamente.

[1] Resultados baseados na publicação **S. Cândido** and J. C. Páscoa, "On modal decomposition as surrogate for charge-conservative EHD modelling of Taylor cone jets", International Journal of Engineering Science, vol. 193, 12 2023. [115]

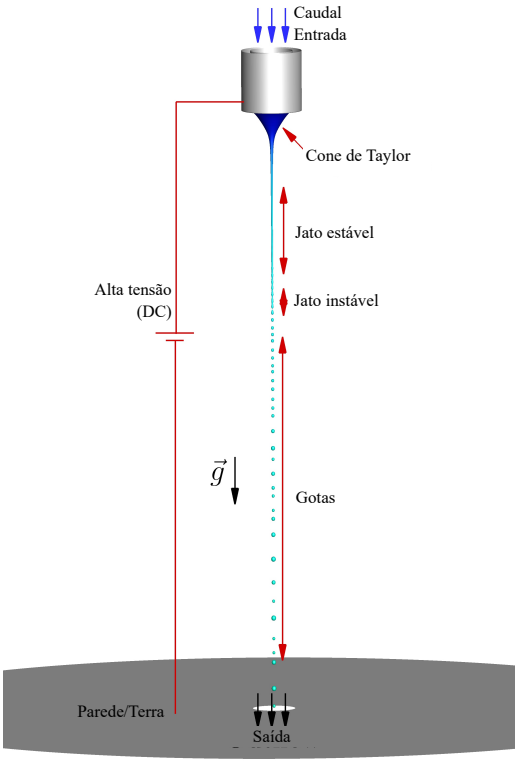


Figura 4.1: Jato eletrohidrodinâmico axissimétrico com cone de Taylor estável.

A quebra do jato gera algumas gotículas que, em condições adequadas, conduzem a um eletrospray onde se gera uma pluma [117]. A formação inicial das gotículas deve-se à formação de uma zona instável que tem um comportamento ondulatório. Neste ponto, conhecido como rutura primária, mantendo determinadas condições, podemos alcançar um modo de emissão estável em que o jato é composto por quatro regiões características. Uma região de cone de Taylor, uma de jato laminar estável, uma de jato ondulatório (que incorpora a transição do jato laminar para a formação de gotículas) e finalmente uma região de emissão de gotículas. A presente secção desta tese foca em particular a dinâmica desta região transiente.

4.1.2 Definição do problema axissimétrico

A geometria de um jato eletrohidrodinâmico com cone de Taylor estável é, tipicamente, composta por uma agulha capilar que está ligada a uma fonte de alta tensão e, na parte da frente, existe uma placa de terra que contribui para gerar um campo elétrico. A geometria está representada na Figura 4.2 com as respetivas condições de fronteira aplicadas. Este caso é baseado nos testes experimentais de [7].
O bocal capilar, também designado por emissor, tem um diâmetro interior de $D_i = 0{,}70$ mm, um comprimento de $L = 1{,}00$ mm e uma espessura de parede de $e = 0{,}15$ mm, o qual define um limite de parede Γ_e. A parede do emissor é colocada a um potencial elétrico igual a $\tilde{\phi}_e = 4$ kV. Uma placa de extração (Γ_g) com um diâmetro exterior de $D_f = 10$ mm e um diâmetro interior $D_o = 0{,}35$ mm é colocada a um potencial elétrico igual a zero.

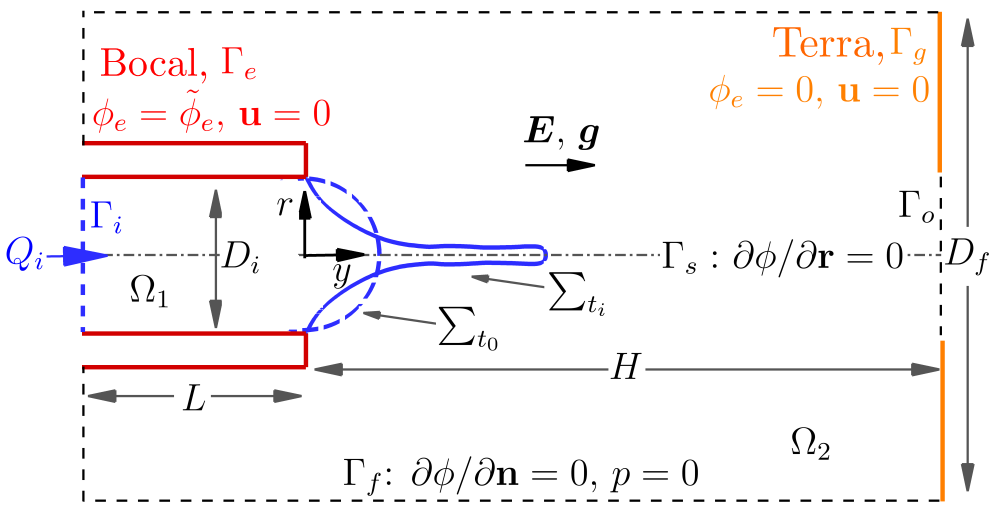


Figura 4.2: Problema do jato eletrohidrodinâmico. Esquema da geometria com indicação do potencial elétrico e a referência às condições de fronteira aplicadas.

Tabela 4.1: Propriedades hidrodinâmicas e elétricas dos fluidos utilizados [7].

Fluido	μ (mPa s)	ε_r (−)	σ (S m^{-1})	ρ (kg m^{-3})	γ (N m^{-1})
Heptano (Líquido)	0.390	1.9	4.5×10^{-6}	685.0	0.021
Ar (Ambiente)	0.0120	1.0	1.0×10^{-15}	1.225	–

Esta placa de extração está a uma distância (da ponta do emissor) igual a $H = 10$ mm. O diâmetro interior é o limite de saída Γ_o de onde as gotículas serão ejetadas. A condição inicial para o volume é definida como ,

$$\sum_{t_0} : \left\{ (y^* < 0 \cap r^* < 1/2) \cup (r^{*2} + y^{*2} < 1) \right\}.$$

O domínio Ω_1 é composta por "Heptano", um líquido condutor, que tem um adicional de 1,0% de stadis. Aqui temos um sistema dc, ver Apêndice B.2. As propriedades hidrodinâmicas e elétricas podem ser encontradas em Tabela 4.1, tanto para o Heptano como para o Ar [7, 48].

4.1.2.1 Condições de fronteira

Uma vez que pretendemos centrar o nosso estudo apenas para a dinâmica do modo de emissão de gotículas constante, não serão consideradas as formações de tipo chicote radial, os jatos múltiplos e as plumas. É utilizado um modelo axissimétrico em que apenas a região de r positivo é explicitamente calculada, constituindo o volume de cálculo. Isto representa uma simplificação do mundo real. Assume-se, com base em dados experimentais, que para as nossas condições de funcionamento (nomeadamente o caudal e o potencial elétrico) nos encontramos numa região estável de funcionamento.
Para todos os casos de teste aqui consideramos a densidade de carga elétrica é sempre especificada como uma condição de fronteira de Neumann, com o gradiente igual a zero.

Assim, e para os casos de teste axissimétricos é aplicada a condição, sobre o eixo de rotação $(\partial\phi/\partial r)_{r=0} = 0$. Nas paredes sólidas assume-se uma condição de não deslizamento, de modo que a velocidade do campo é igual à velocidade na parede, que é zero. Além disso, o potencial elétrico é constante e o gradiente de pressão é nulo. A parede representa os elétrodos, sendo Γ_e o limite dos elétrodos de potencial mais elevado e positivo e Γ_g o limite da parede do solo. No limite da atmosfera que envolve o sistema, o gradiente de velocidade é zero, o gradiente de potencial elétrico é zero e a pressão relativa é zero. Cada condição é definida para as células apropriadas, ou seja,

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = \tilde{\phi}_e, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_e, \quad (4.1)$$

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_g, \quad (4.2)$$

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_{in}, \quad \alpha = 1, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \phi_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_i, \quad (4.3)$$

$$p = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[\boldsymbol{u}, \alpha, \phi_e, \rho_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \{\Gamma_o, \Gamma_f\}, \quad (4.4)$$

onde $\boldsymbol{n}$ é o vetor normal à fronteira correspondente. Para o eixo de simetria (Γ_s) todos os campos têm uma condição de eixo de rotação $(\partial\phi/\partial \boldsymbol{r})_{r=0} = 0$. Para todos os cálculos numéricos é imposta uma condição inicial. Na condição inicial do sistema em $t = t_0$, as condições iniciais para o campo ao longo do domínio Ω_0 são tomadas como zero, exceto a fração de fase α. Para o campo α é definido um volume inicial $\sum_{t_0}$, onde $\alpha \in \sum_{t_0} = 1$ e $\alpha \notin \sum_{t_0} = 0$.
A velocidade de entrada $\boldsymbol{u}_{in}$, que tem apenas uma componente na direção axial é calculada em função do caudal de entrada Q_i e do diâmetro de entrada como:

$$\boldsymbol{u}_{in} = (u_r, u_y) = \left(0, \quad \frac{4Q_i}{\pi^{-1} D_i^{-2}}\right) \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_i, \quad (4.5)$$

As variáveis características são o diâmetro das gotas d_0 e o caudal de entrada Q_0, e são utilizadas para normalizar a variação do caudal de entrada e o diâmetro das gotas de saída. O diâmetro interior normalizado do bocal é então $D_i^* \approx 143$ e a distância de eletrização $H^* \approx 2036$. É assim possível ver as diferentes escalas envolvidas.

4.1.3 Detalhes numéricos

Nesta secção apresentamos alguns resultados importantes para a definição do modelo computacional, ainda antes de analisar os resultados finais. O primeiro passo é determinar qual o tamanho das células computacionais que proporciona a melhor resolução do escoamento, tal que um aumento na resolução da malha não influencie a solução obtida. Tendo fixado a malha computacional iremos ver a influência do método de interpolação das propriedades elétricas do escoamento e, por fim, o impacto do esquema de compressão da interface (entre o esquema MULES e o isoAdvetor).
Consideramos que todas as simulações foram feitas para um tempo de escoamento igual

a $t_f = 20\ \mathrm{ms}$ e que todas atingiram um estado periódico/estacionário neste tempo (isto é explicado detalhadamente mais à frente nos resultados temporais). Consideramos também que o diâmetro das gotas emitidas tem um comportamento gaussiano normal, significando que os valores aqui apresentados para os tamanhos das gotas são baseados no valor médio das distribuições normais geradas (que serão detalhadas mais à frente).

4.1.3.1 Sensibilidade da discretização espacial

A distância entre a ponta do bocal e a placa de terra é da $O(10)\ \mathrm{mm}$, o diâmetro do bocal é da $O(1)\ \mathrm{mm}$ e o diâmetro das gotas é da $O(0{,}05)\ \mathrm{mm}$ (como se assume dos resultados experimentais da literatura). Esta diferença de escalas faz com que seja necessário calcular um grande número de células com uma malha Euleriana fixa e uniforme, pelo que a densidade da malha no bocal e na região de desenvolvimento do jato é muito elevada em comparação com a densidade da malha no campo mais distante. Para garantir uma boa resolução da malha foram discretizados e calculados três níveis de refinamento diferentes para analisar a sensibilidade dos resultados à malha.

Devemos assegurar que a densidade da malha é adequada de modo a tender para os resultados exatos dentro de determinada tolerância. A ordem de refinamento é aqui definida pela distância radial da célula na região do jato δr, neste caso a variável $w^* = \delta r/(D_i/2)$ que representa a largura da interface. Isto fornece a percentagem do tamanho das células em comparação com o tamanho do bocal. Para conhecer a ordem de convergência da malha, é efetuada uma extrapolação de Richardson, utilizando o Índice de Convergência da Malha (GCI), conforme descrito por [118]. Considerando um rácio de refinamento da malha de r_g (que no nosso estudo foi sempre dois), a ordem de convergência, q, é calculada como,

$$q = \ln\left(\frac{d_3 - d_1}{d_2 - d_1}\right) / \ln(r), \quad (4.6)$$

E o erro relativo entre malhas é definido como,

$$\mathrm{GCI}_{12} = \left|\frac{d_2 - d_1}{d_1}\right| \frac{F_s}{(r^q - 1)}, \quad (4.7)$$

$$\mathrm{GCI}_{23} = \left|\frac{d_3 - d_2}{d_2}\right| \frac{F_s}{(r^q - 1)}. \quad (4.8)$$

Os resultados para a sensibilidade da malha são apresentados na Tabela 4.2 e mostram que a variação entre as duas malhas mais refinadas é muito pequena, levando a considerar que o nível de refinamento da Malha 3 é suficientemente preciso para os cálculos, significando assim que atingimos uma independência da malha. O diâmetro das gotas obtido experimentalmente, para a condição $\approx 83Q_0$, tem uma diferença relativa em relação aos nossos resultados numéricos $e_r(d_d)$ de $1{,}293\%$. A ilustração do nível de refinamento da malha pode ser observada na Figura 4.3 e os resultados na Tabela 4.2.

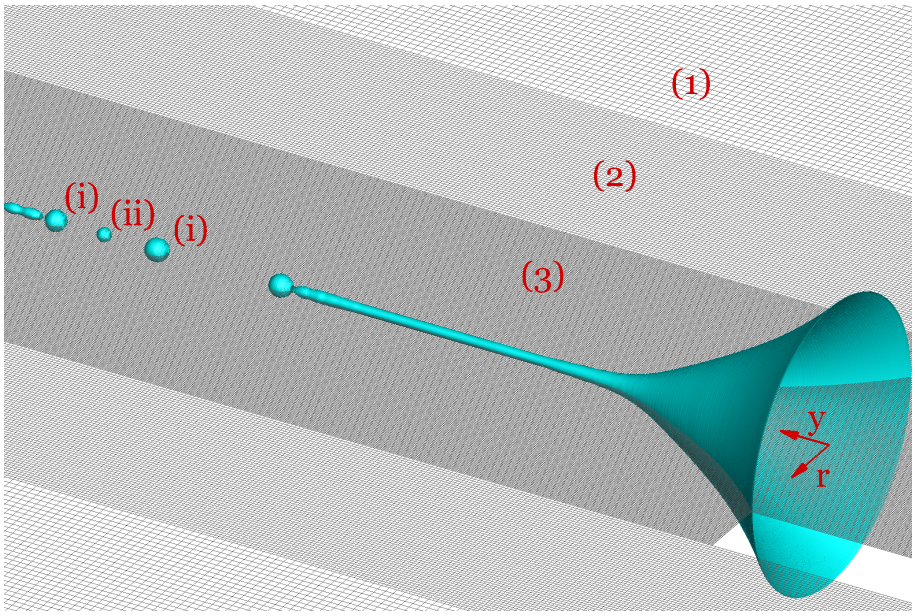


Figura 4.3: Ilustração do refinamento da malha, com os três diferentes tamanhos de malha computacional testados, sendo a região (1) o tamanho inicial e (3) a grelha mais refinada que é 4 vezes mais pequena do que (1). (i) são as gotículas principais que têm entre si (ii) gotículas satélites.

Tabela 4.2: Sensibilidade da grelha ao diâmetro da gota. Erro relativo em comparação com os dados experimentais de [7]. A interpolação GCI de d_s tem um $q = 5{,}1$ e a de d_d tem um $p = 1{,}8$. É utilizado um fator de segurança $F_s = 1{,}25$.

Malha	$w^*(\%)$	Q_i/Q_0	d_s (µm)	d_d (µm)	GCI_{d_s} (%)	GCI_{d_d} (%)
1	6.250	82.93	19.349	50.604	–	–
2	3.125	82.93	7.189	53.475	6.303	2.614
3	1.563	82.93	6.837	52.670	0.192	0.745

Tabela 4.3: Comparação entre os valores experimentais do diâmetro da gota e da corrente gerada com as simulações numéricas para as duas formulações diferentes de cálculo das propriedades elétricas. Resultados para três caudais de entrada diferentes.

Q	u_{in}	Diâmetro das gotas, d			Corrente elétrica, I		
($\mathrm{mm^3\,s^{-1}}$)	($\mathrm{mm\,s^{-1}}$)	Exp (µm)	e_r^{WHM} (%)	e_r^{WAM} (%)	Exp (nA)	e_r^{WHM} (%)	e_r^{WAM} (%)
4,0	10,40	47,12	2,135	1,163	68,40	7,877	118,189
4,5	11,70	49,66	0,105	1,134	70,95	6,103	140,400
5,0	13,00	53,36	3,544	4,423	72,85	2,559	142,070

4.1.3.2 Métodos de Interpolação

À semelhança do problema hidrodinâmico, a solução do problema do campo elétrico requer uma interpolação para as propriedades no campo. Enquanto que para as propriedades hidrodinâmicas $\{\rho, \mu\}$ a média aritmética é usualmente suficiente, para as propriedades elétricas existem estudos que mostram que uma abordagem com interpolação harmónica dá melhores resultados [46]. A explicação está associada às propriedades elétricas, sobretudo para o nosso sistema dc, no qual há consideráveis diferenças em escala, principalmente na condutividade. Assim, iremos testar a utilização de interpolação por média aritmética ponderada (WAM) e ainda a interpolação por média harmónica ponderada (WHM). A WHM é dada por,

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_1}\alpha + \frac{1}{\sigma_2}(1-\alpha) \qquad \forall \mathbf{x} \in \Omega_0, \tag{4.9}$$

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon_1}\alpha + \frac{1}{\varepsilon_2}(1-\alpha) \qquad \forall \mathbf{x} \in \Omega_0. \tag{4.10}$$

Para efetuar o teste para obter a solução para caudais de entrada diferentes e utilizando as duas abordagens distintas, WAM e WHM. Estas duas abordagens são analiticamente idênticas, portanto esperava-se que fossem geradas interfaces menos difusas quando o jato se dividisse em gotículas. Em arestas vivas desenvolverem-se pequenos valores das propriedades elétricas do líquido, pelo que se esperavam diferenças significativas entre as duas abordagens. Os resultados estão expressos na Tabela 4.3, sendo e_r o erro relativo entre os resultados obtidos e os dados experimentais.

No que diz respeito à Tabela 4.3 os resultados mostram uma redução efetiva do erro ao utilizar uma interpolação WHM para as propriedades elétricas. A diferença entre a interpolação WAM e WHM é considerável em termos de precisão do valor da corrente elétrica, em comparação com os dados experimentais. Para os resultados do diâmetro das gotas, a ordem de grandeza do erro é a mesma. Para um caudal de $Q = 4{,}5\ \mathrm{mm^3\,s^{-1}}$ os resultados para WHM mostram um erro muito baixo, mas consideramos que o erro geral é da ordem de 2% com base nos outros caudais. Isto deve-se à grande diferença do módulo da condutividade entre os diferentes fluidos envolvidos, assim o esquema de interpolação harmónico é o esquema de interpolação escolhido para todos os cálculos futuros.

4.1.3.3 Esquema de compressão da interface [2]

A diferença entre o cálculo com o MULES e o isoAdvector é mais significativa na zona da quebra do jato e das gotículas, Figura 4.4 e 4.5. A Figura 4.4 mostra a diferença na fração de fase obtida em cada um dos cálculos. Para o cálculo com o refinamento médio da malha, o limite da fração de volume de $\alpha = 0{,}999$ nas gotículas é captado apenas usando o isoAdvector. O aumento da resolução da interface alonga o jato antes que ele se rompa. Na Figura 4.4 (b), a seta aponta para a altura em que o jato se parte quando se usa o isoAdvector.

Nas figuras seguintes são apresentadas comparações entre o método algébrico (MULES) e o geométrico (isoAdvector). A resolução da interface tem um grande impacto na modelação dinâmica da interface. A força elétrica volumétrica é dominante na interface devido à acumulação de cargas elétricas. O campo vetorial da força elétrica volumétrica é apresentado na Figura 4.5, para o cálculo com o MULES e o método isoAdvector. Esta figura apresenta também a delimitação da interface, com as linhas dos iso-valores da fração de fase α, para $0{,}001$ e $0{,}999$. A interface é representada com a fração volumétrica de $\alpha = 0{,}5$. Neste caso é possível ver que o campo vetorial é significativo na região da interface e tem valores maiores com o método MULES. O método isoAdvector mostra uma largura de interface menor, com uma diminuição significativa, em cerca de 43%, em relação ao cálculo com o MULES.

A Figura 4.6 mostra o campo vetorial da velocidade do escoamento, colorido pelo módulo e normalizada pela velocidade de entrada. É possível notar uma região de recirculação no interior do cone de Taylor. O escoamento fora do líquido é o mais acelerado, chegando a 700 vezes a velocidade da entrada. No ponto de $y = -0.8$ mm o jato é desenvolvido com um diâmetro de $D_{in}/13.258$ com o MULES e $D_{in}/9.511$ com o isoAdvector, com uma velocidade normalizada no interior do jato de 171.708 e 118.63, respetivamente.

4.1.4 Resultados e discussão

Com os resultados numéricos acima detalhados e, de modo a mantermos a melhor precisão possível, a partir deste ponto todos os cálculos descritos nesta tese utilizam o método de interpolação harmónico para as duas propriedades elétricas e a compressão da interface VoF é feita pelo esquema geométrico isoAdvector. Para além disto os resultados agora apresentados utilizam a malha refinada *Grid 3*.

4.1.4.1 Dinâmica do jato e geração das gotas

A resolução da superfície livre com o modelo de compressão da superfície permite o cálculo adequado das diferentes regiões do jato: a formação do cone de Taylor, incluindo, a formação do jato e a rutura primária do *eletrospray*. A Figura 4.6 mostra a evolução do cálculo do jato axissimétrico onde a condição inicial imposta até ao estado periódico esta-

[2] Resultados publicados em **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical Simulation of Electrified Liquid Jets Using a Geometrical VoF Method, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Virtual, Online. 2021 [6]

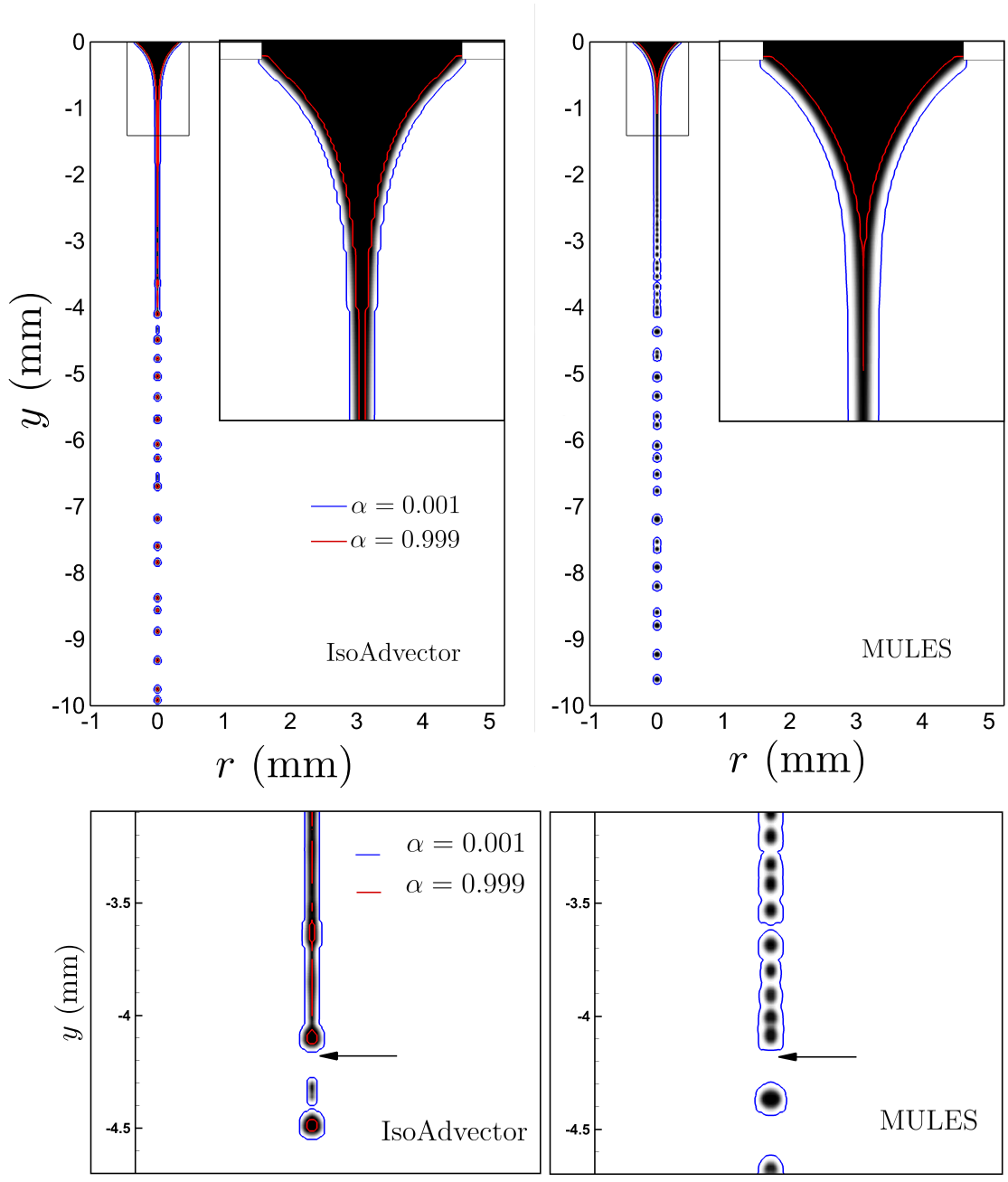


Figura 4.4: Iso-valores da fração de volume para os limites da interface.

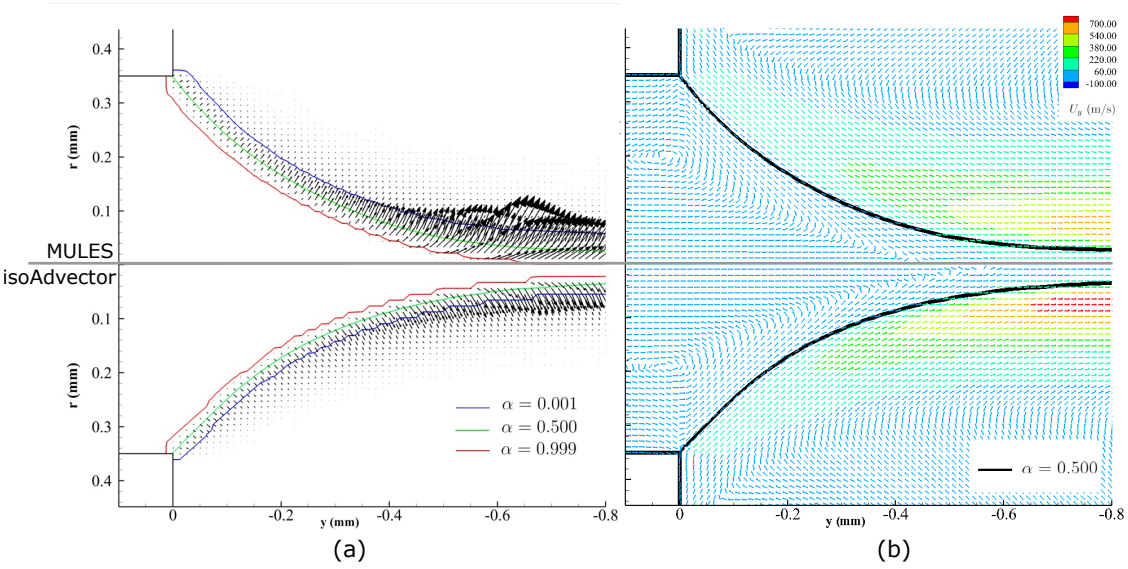


Figura 4.5: Campo vetorial da (a) força elétrica volumétrica $\mathbf{f}_e$ para o cálculo obtido com o esquema MULES e com o isoAdvector. As linhas de isovalor são para a fração volumétrica. (b) Velocidades coloridas pelo módulo da velocidade na direcção axial normalizada pela velocidade de entrada. A linha preta é a interface. [6]

cionário. Como é possível verificar e a partir dos 10 ms, o comprimento do jato começa a estabilizar num certo valor e a emissão de gotas é contínua. Nesta figura o comprimento do jato L_{jet} é normalizado pelo valor final atingindo (posição no eixo y), resutando em $\langle L_{jet} \rangle$. Este é o comportamento usual quando o cone de Taylor consegue entrar em modo de emissão continua, contudo, se as condições impostas não forem adequadas não entra neste regime. Nesta secção apenas serão mostrados casos que atingem esta condição, pelo que para todos eles as simulações foram feitas para um tempo total de escoamento de 20 ms.

Para validar o modelo de captura da rutura e para aferir a resolução do diâmetro das gotículas são testados três caudais de entrada, com $Q^* = Q_i/Q_0 = \{66{,}34; 74{,}64; 82{,}93\}$. Para estes caudais de entrada, os números de Reynolds que lhes estão associados são, $Re = \{12{,}787; 14{,}385; 15{,}983\}$, calculados a partir de,

$$Re = \frac{u_i D_i \rho_1}{\mu_1} = \frac{4\varepsilon_0}{\pi\sigma}\frac{\gamma}{\mu_1}\frac{Q^*}{D_i}. \quad (4.11)$$

Esta equação é importante porque relaciona o regime de escoamento com as leis de escala, definindo o tipo de líquido pela condutividade e não pela permissividade. Medindo o diâmetro das gotas satélite d_s e das gotas principais d_d determinamos a sensibilidade da malha e, por conseguinte, a sua convergência. Podemos observar que o diâmetro do jato é $\approx 5\%$ de D_i na região do jato estável ($y^* = 2.0$). Considerando esta redução do diâmetro na equação 4.11, onde o diâmetro caraterístico (na expressão como D_i) é substituído pelo diâmetro do jato, o número de Reynolds aumenta em 20 vezes. As dimensões das gotas são calculadas utilizando um detetor de partículas adaptado de [119], em que uma gota é

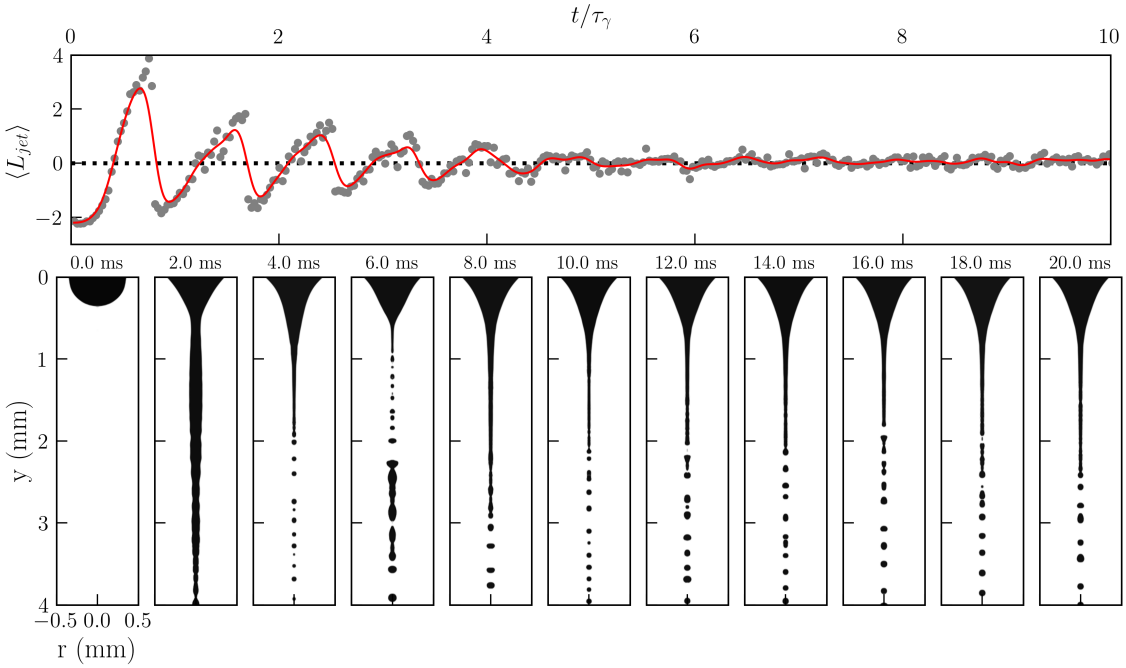


Figura 4.6: Evolução temporal do jato do cone de Taylor desde a condição inicial até ao jato estável. Para um potencial elétrico aplicado de 4kV e $5Q_0$ [5].

contada se a razão entre o diâmetro axial e o diâmetro radial for inferior a 2, limitando assim a deteção a gotas esféricas. Este detetor de partículas utiliza a célula da fronteira de saída, para a qual consideramos o caudal volumétrico, através da face $\phi_{n,t}$ para cada célula n, e no tempo t, em Γ_o de modo que,

$$\Delta V_{n,t} = \alpha_{n,t} \cdot |\phi_{n,t}| \cdot \Delta t_t, \tag{4.12}$$

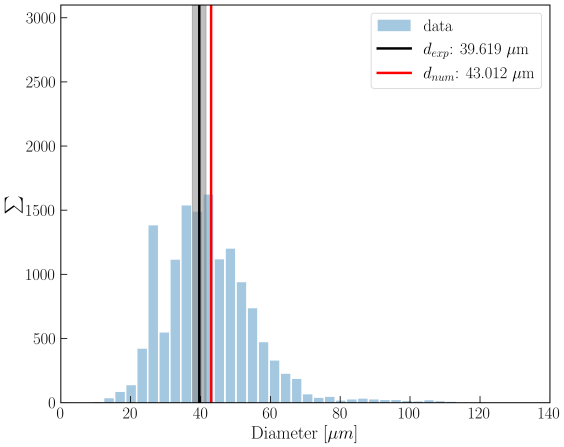
$$V_d = \sum_t \sum_n \Delta V_{n,t}, \tag{4.13}$$

$$\mathbf{x}_d = \left(\sum_t \sum_n \Delta V_{n,t} \cdot \mathbf{x}_{n,t} \right) / V_d. \tag{4.14}$$

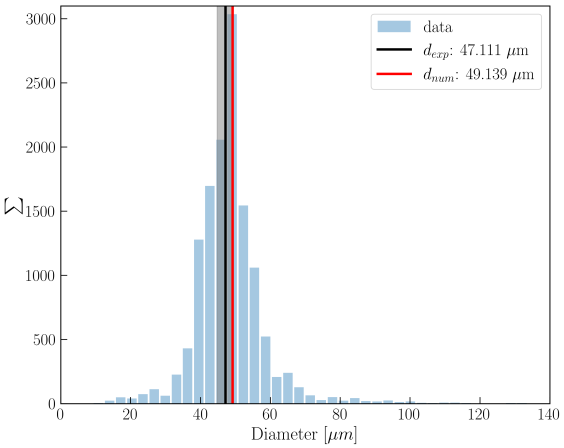
A comparação com os resultados experimentais é feita através da média do diâmetro das gotículas contadas. O número de gotículas contadas em função do seu diâmetro é apresentado num gráfico de histograma. A Figura 4.7 mostra três dos resultados para um potencial elétrico $37\phi_{e_0}$. A representação do histograma mostra uma distribuição normal das gotículas e é aplicada uma curva de ajuste de Gauss a cada uma. Os resultados são comparados com os resultados experimentais de [7] onde um desvio relativo dos resultados é de $\{1{,}030; 1{,}006; 1{,}293\}\%$, respetivamente para os caudais de entrada de $Q_i/Q_0 = \{66{,}34; 74{,}64; 82{,}93\}$.

Os testes são posteriormente estendidos para outros potenciais elétricos como 35 e $41\phi_{e,0}$, e os resultados são mostrados na Figura 4.8. Para diferentes potenciais elétricos, o tamanho da gota não difere mais do que 7%, o que está de acordo com os testes experimentais.

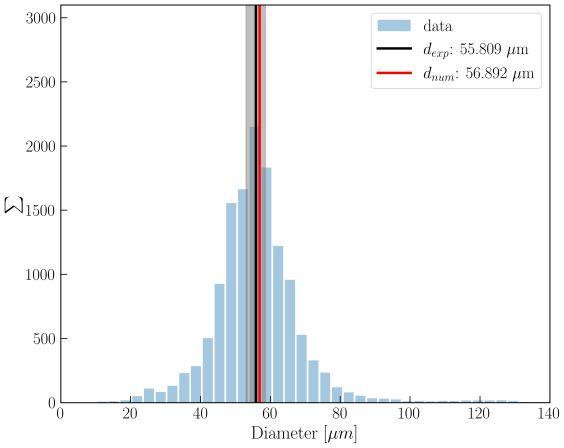
A Figura 4.9 mostra os dois campos mais importantes na dinâmica do jato. São eles a



(a) 3 nL s^{-1}

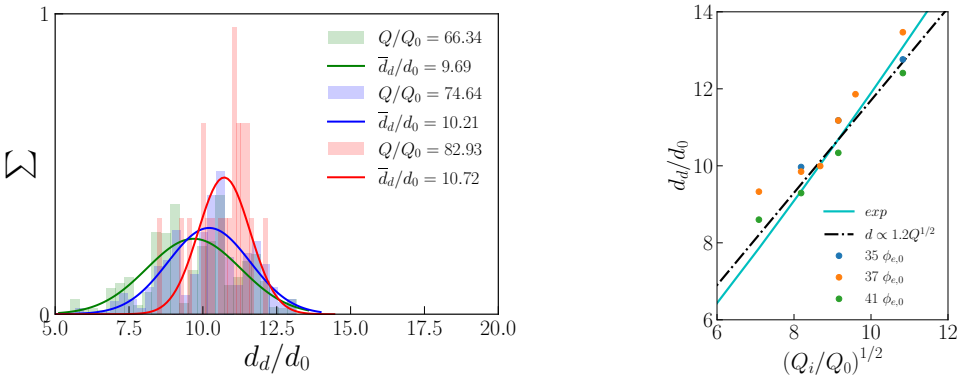


(b) 4 nL s^{-1}



(c) 5nL s^{-1}

Figura 4.7: Validação do tamanho da gota vs. resultados experimentais. (a) Histograma para uma condição de trabalho $4 - 0 - 0$ kV e caudal de entrada de $5Q_0$. (b) Variação do tamanho da gota com o caudal de entrada.



(a) (b)

Figura 4.8: (a) Resultados para o cálculo do diâmetro principal das gotículas, ajustando a contagem de gotículas a uma curva gaussiana normal. (b) Medições do diâmetro das gotas para diferentes condições de trabalho e apresentação de um estudo comparativo com os resultados de [7].

velocidade axial, u_y, e a densidade de carga elétrica, ρ_e. O u_y é normalizado pela velocidade de entrada u_{in} e o ρ_e é normalizado pelo valor máximo ρ_e^{max}. Note-se que a carga elétrica apresenta os maiores valores nos antinós do jato ondulatório, e o comprimento de onda Λ do jato é definido por estes. É por isso que é interessante estudar o comportamento não linear do campo ρ_e da carga elétrica para determinar as frequências fundamentais do jato ondulatório, e não de outro campo escalar. Para obter o comprimento de onda do jato usando o campo α é necessário ter em conta a coordenada $2D$ (r, y) para avaliar onde existe um nó e um antinó (pelo valor de r). Mas com a limalha ρ_e, uma simples análise $1D$ é suficiente porque teremos uma acumulação de carga no antinó. Com uma simples análise da flutuação da densidade de carga elétrica ao longo da superfície do líquido podemos obter esta informação.

Os efeitos de inércia no líquido são normalizados por $\rho(QR_d^{-2})^2$ e, como discutido acima, a força eletrostática atuante é normalizada por $\varepsilon_0(E_0^2)$. Comparando os dois e utilizando os grupos adimensionais discutidos anteriormente, é possível determinar a escala do módulo do campo elétrico como,

$$E_0 \sim \left(\frac{\gamma}{\varepsilon_0 d_0}\right)^{1/2}. \quad (4.15)$$

O valor padrão E_∞ é calculado de $E_\infty = \tilde{\phi}_e/H$ e pode ser relacionado com E_0 através de $E_0^* = E_\infty/E_0 = 1{,}24$. A escala do potencial elétrico é $\phi_{e,0} = E_0 d_0$, que é utilizada aqui para normalizar a condição de funcionamento [89]. A força elétrica volumétrica pode ser obtida a partir da integração na superfície do MST ($\sim \varepsilon_0 E_0^2$). Um valor de referência é dado por $f_{e,0} \sim \varepsilon_0 E_0^2/R_i = (\gamma/d_0)/R_i$ e assim $f_e^* = f_e/f_{e,0}$, ver Figura 4.10b. A figura mostra o valor normalizado da força elétrica volumétrica na interface do líquido para um momento inicial e aquando da emissão estável de gotículas do jato.

A força tem uma componente radial, mas esta é equilibrada pela condição axissimétrica. O que impulsiona o jato é a componente axial do vetor velocidade. É possível observar que a força elétrica volumétrica é elevada na região da ponta do cone de Taylor e diminui

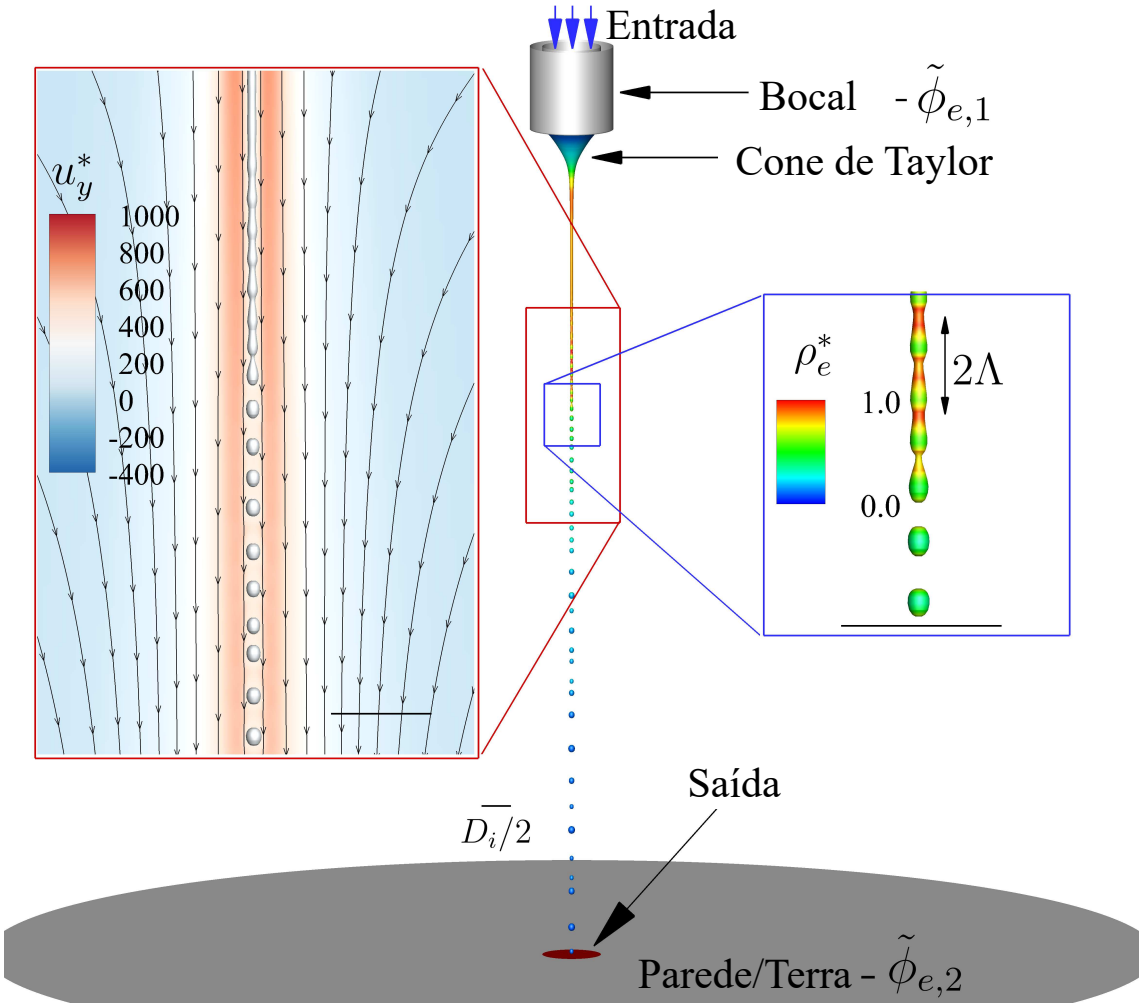


Figura 4.9: Resultados da simulação para o jato do cone de Taylor com desagregação em gotículas. Os resultados mostram a isosuperfície para uma fração de fase de 0,5, correspondente à superfície livre do jato de líquido. A isosuperfície é colorida pela densidade de carga ρ_e. São efetuadas duas ampliações para ver a quebra. As barras horizontais cinzentas são barras de escala que correspondem a $400\ \mu\mathrm{m}$ na imagem correspondente. Estes resultados são para a condição de funcionamento de $83Q_0$.

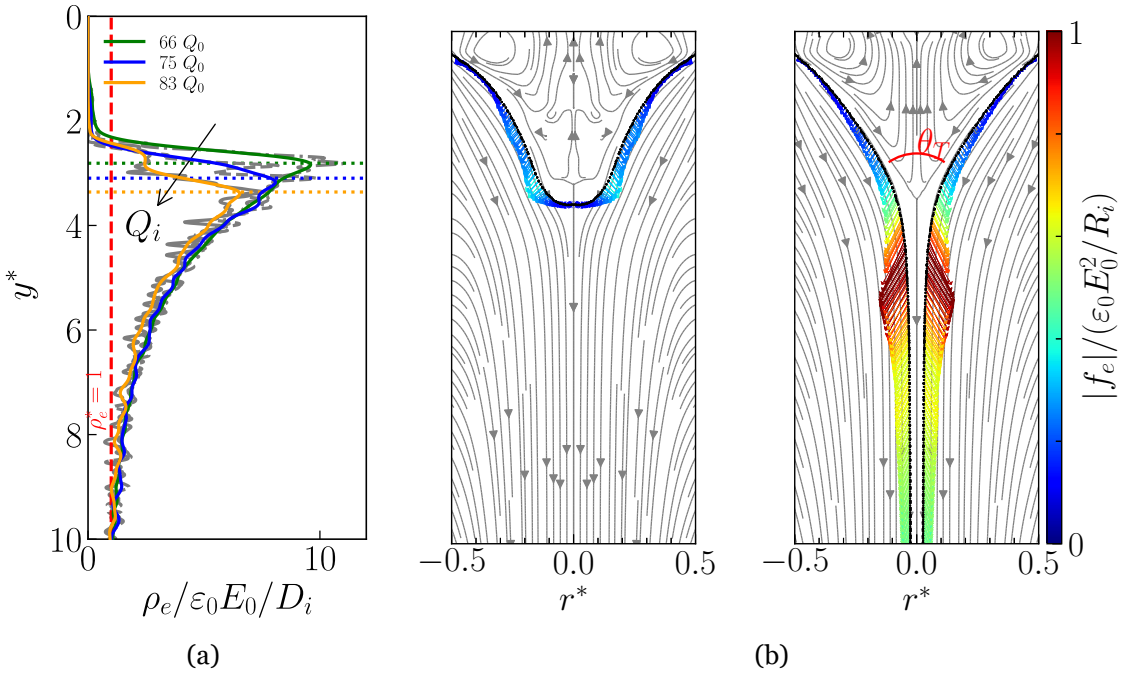


Figura 4.10: (a) Média temporal da magnitude da densidade de carga elétrica ao longo do eixo y, para diferentes condições de caudal de entrada. (b) Instantâneos temporais da força elérica volumétrica, na interface do líquido, para um tempo de escoamento (b-esquerda) $3\tau_\gamma$ e (b-direita) $10\tau_\gamma$. Estes resultados são para a condição de funcionamento de $83Q_0$. (b) Distribuição da pressão no jato

com o comprimento do jato.

O cone de Taylor assim formado tem um ângulo caraterístico que definimos como θ_T. Este ângulo é medido entre as linhas de corrente que atingem o ponto de estagnação do jato. O ponto de estagnação do cone de Taylor pode ser observado na Figura 4.10b, na coordenada $r^* = 0$. Para diferentes condições do caudal de entrada este ângulo muda. Os caudais de entrada testados $\{66; 75; 83\}Q_0$, e os ângulos do cone de Taylor medidos no estado de emissão estável foram $\theta_T = \{34{,}258; 31{,}018; 28{,}937\}(^\circ)$. O ângulo do cone diminui com o aumento do caudal de entrada porque o cone é alongado. O ponto de estagnação muda a sua localização axial como $y_s/D_i = \{0{,}701; 0{,}764; 0{,}907\}$, onde y_s é a distância axial ao ponto de estagnação.

Este ângulo é diferente do ângulo medido entre o ponto de estagnação e a ponta do bocal, $\theta_s = \tan^{-1}(D_i/(2y_s))$. Comparando os dois ângulos, para cada caudal de entrada, então θ_T/θ_s é a relação $\{2{,}07; 2{,}13; 2{,}00\}$, e concluímos que é uma relação de ≈ 2.

4.1.4.2 Análise detalhada do escoamento

Com o modelo calibrado e validado iremos agora analisar os campos adjacentes à dinâmica do jato por cone de Taylor. Os dois campos que fazem mover o jato são primeira matéria de análise. São estes o campo de velocidades e, em especial, o campo elétrico. Vejamos então na Figura 4.11 as representações dos campos mais importantes neste tipo de escoamento EHD para a primeira emissão de gotas. Primeiramente vemos como a presença do jato líquido deforma o potencial elétrico e, por conseguinte, as linhas de corrente tangenciais os campo elétrico. é interessante notar que o campo elétrico é concentrado na

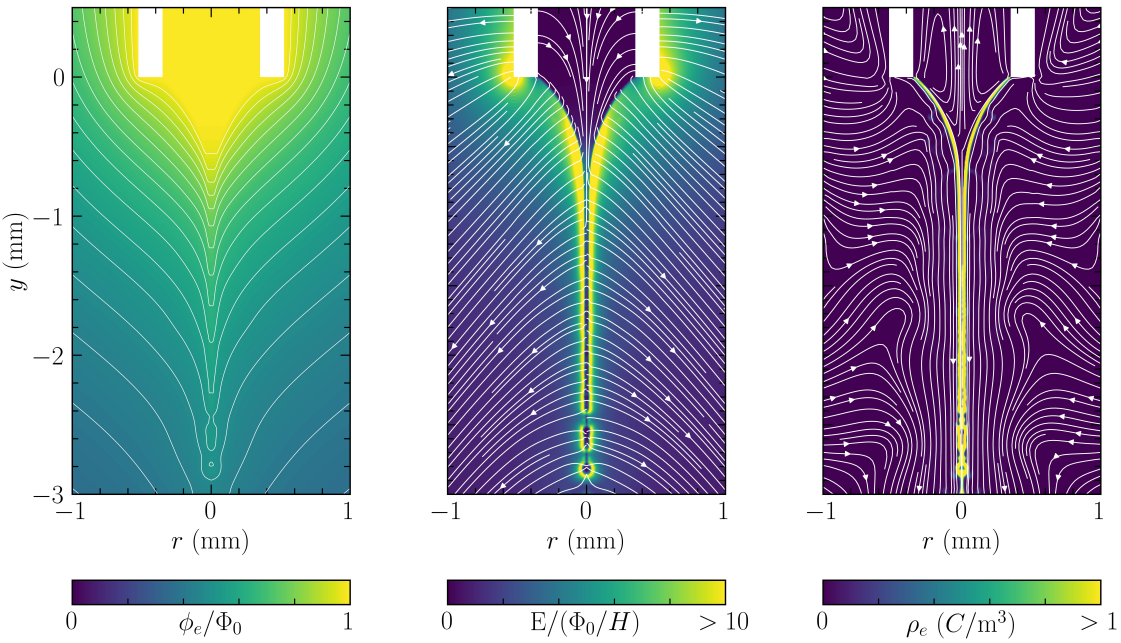


Figura 4.11: Visualização de diferentes campos e linhas de corrente. (esquerda) Campo do potencial elétrico com as algumas iso-linhas do mesmo campo. (centro) Campo colorido com o módulo do campo elétrico e as correspondentes linhas de corrente tangenciais a cada ponto do campo. (direita) Campo colorido pela densidade de carga elétrica e linhas de corrente tangenciais ao campo vetorial da velocidade.

extremidade do bocal e na região do ponto de estagnação do cone de Taylor (bico do cone). Vemos ainda que, como seria de esperar, tendo em conta o modelo EHD utilizado, as cargas elétricas estão concentradas na interface do cone de Taylor bem como no jato e nas gotas emitidas.

Vejamos agora o campo computacional completo para um momento em que o jato já se encontra em estado de emissão de gotas estável. A Figura 4.12 mostra estes dois campos através das linhas de corrente tangenciais em cada ponto ao respetivo campo vetorial. Veja-se que a azul está o jato líquido e que este está especialmente ligado ao campo elétrico, de tal maneira que este é influenciado pela presença da fase líquida, ao contrário do campo da velocidade que na região do jato se apresenta paralelo.

Como neste trabalho consideramos o modelo dielétrico com fugas, a carga elétrica será acumulada na interface do jato, ver Figura 4.13. Esta figura mostra a densidade da carga elétrica no campo, onde se observa uma acumulação notável da carga elétrica na interface. Embora seja possível ver uma menor densidade na maior parte do domínio do ar, isto deve-se à conservação da carga elétrica, governada pelas equações que regem o escoamento. Isto implica que as cargas elétricas, depois de saturadas na interface, começam a vazar para o meio dielétrico que, neste caso, é o ar.

A acumulação de carga elétrica está limitada à zona tampão entre as fases líquida e gasosa, deixando a maior parte do líquido *quase* eletricamente neutro. Podemos ver isto na Figura 4.14. Uma vez que o líquido utilizado nesta simulação é considerado um líquido condutor, ou seja, $\sigma > 10^{-8}$, isto está de acordo com o carregamento de líquidos condutores em que a carga elétrica migraria para a camada superficial do líquido. Isto corrobora os resultados de [48]. Num sistema estacionário a carga só existirá na interface à medida que o líquido

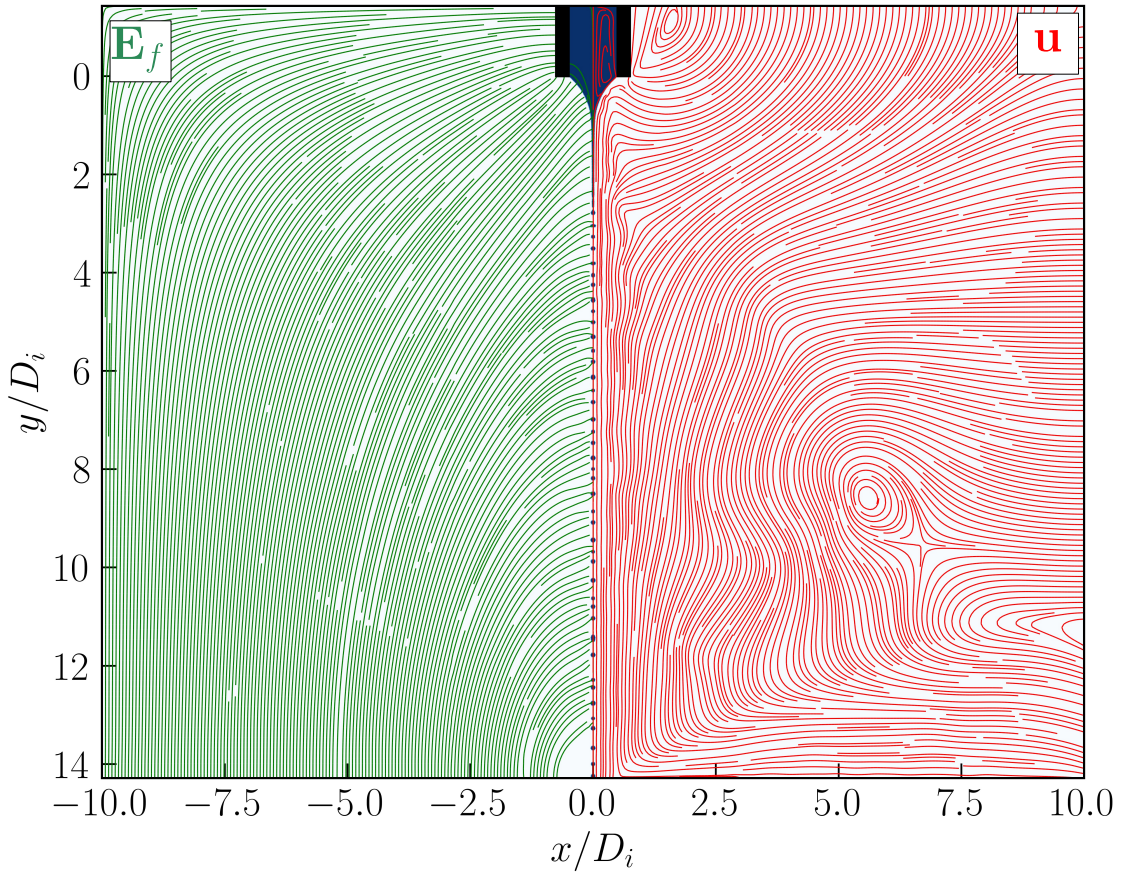


Figura 4.12: Linhas de campo para o campo elétrico E_f (a verde) e para o campo da velocidade (a vermelho)

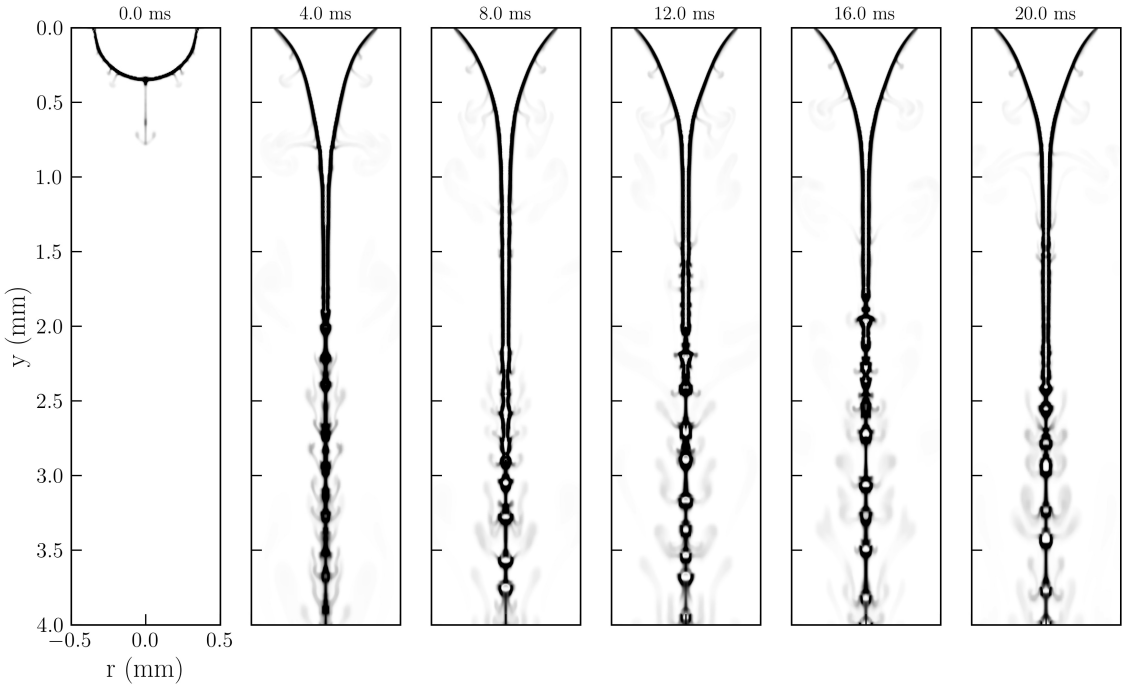


Figura 4.13: Dinâmica da densidade da carga elétrica no domínio. Para um potencial elétrico aplicado de 4 kV e 5 nL s^{-1}. O campo de carga elétrica delimita-se entre $[0, 1]$ C m^{-3} [5].

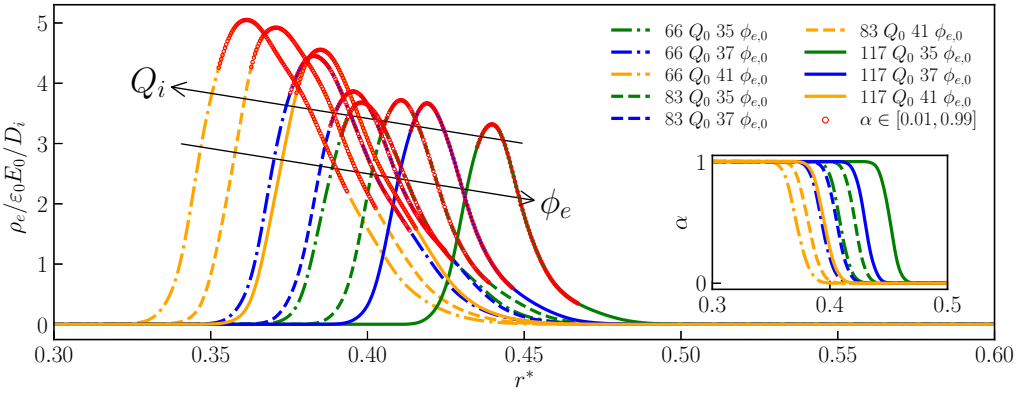


Figura 4.14: Distribuição da densidade de carga elétrica na direção radial, para $y^* = 1$. Os pontos vermelhos marcam a região da fração de fase $\alpha \in [0{,}1; 0{,}9]$ que é onde a interface está centrada.

se move através do cone de Taylor, a carga total acumula-se na interface, embora essa carga seja fornecida pela condução elétrica na massa do líquido [120]. Isso significa que, no comportamento transiente de nossos cálculos, haverá densidade de carga no volume, mesmo que seja de magnitude muito baixa em comparação com a acumulada na interface. O que está em consonância com o comportamento transiente da carga descrito por outros trabalhos [121].

Os resultados da distribuição de carga elétrica, ver Figura 4.14, mostram a importância da análise do seu comportamento transiente, pois a inferência de que as cargas estão apenas na interfacenão é uma verdade absoluta para a dinâmica do escoamento, uma vez que as cargas estão a fluir no domínio volumétrico. Além disso, as condições de operação do potencial elétrico e do caudal da entrada determinam a estabilidade do jato do cone de Taylor, nomeadamente em relação à emissão de gotículas. Assim, se o campo elétrico aumentar a carga das gotículas para além do limite elétrico de Rayleigh ($\approx 64\pi^2\varepsilon_0\gamma d^3$), a emissão será instável, pelo que é necessário manter uma janela estreita de operação [51].

Vejamos agora a distribuição da carga elétrica e o comportamento do cone de Taylor e do jato emitido para uma variação no caudal de entrada e no potencial elétrico aplicado. A Figura 4.15 mostra a matriz de condições aplicadas num eixo para três caudais de entrada e noutro eixo para o potencial elétrico aplicado. Ao analisar constatamos que o aumento do caudal de entrada influencia mais o comprimento do cone e do jato, contudo, vemos que é o potencial elétrico que influencia a curvatura deste último.

Como detalhado na introdução, neste tipo de jatos a quebra em gotas é em regime de onda, que é traduzido pelas variações de pressão ao longo da superfície, e que fazem com que o jato quebre. Observemos finalmente a pressão ao longo da superfície, e para dois caudais de entrada diferentes, Figura 4.16. Ao analisar a figura percebemos as diferentes zonas de aumento de pressão nos nós de quebra. Para um caudal de entrada maior vemos uma gota satélite que apresenta a particularidade de ter uma pressão elevada, isto é normal neste tipo de gotas pois a tensão superficial é tão forte que a gota está elevada pressão e muito coesa.

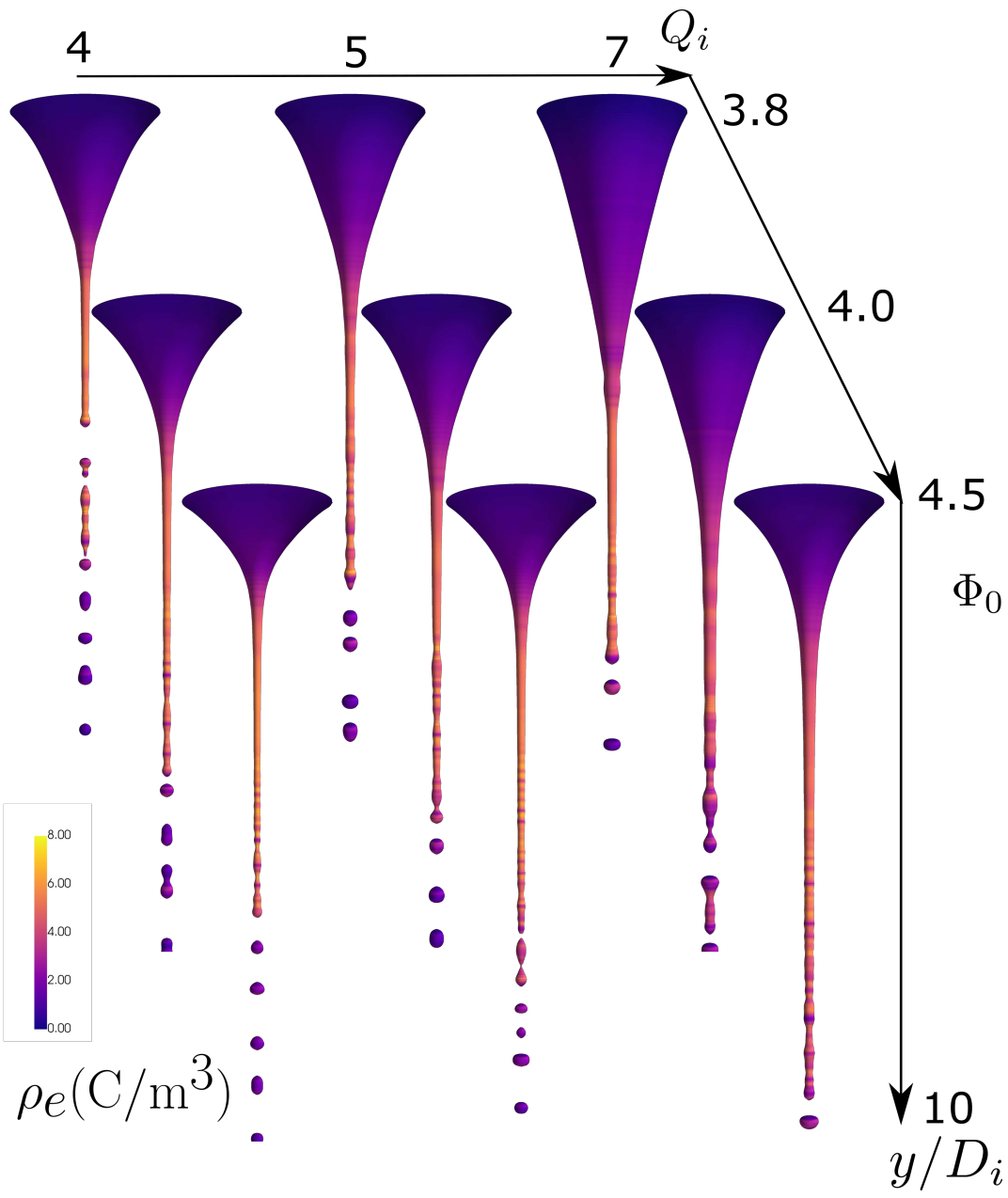


Figura 4.15: (esquerda) Ao lado está representada a interface para o caso de $75Q_0$. As linhas cinzentas representam o valor instantâneo para $10\tau_\gamma$. Estes resultados são para a condição de funcionamento de $83Q_0$. (b) Iso superficies para os caudais mencionados.

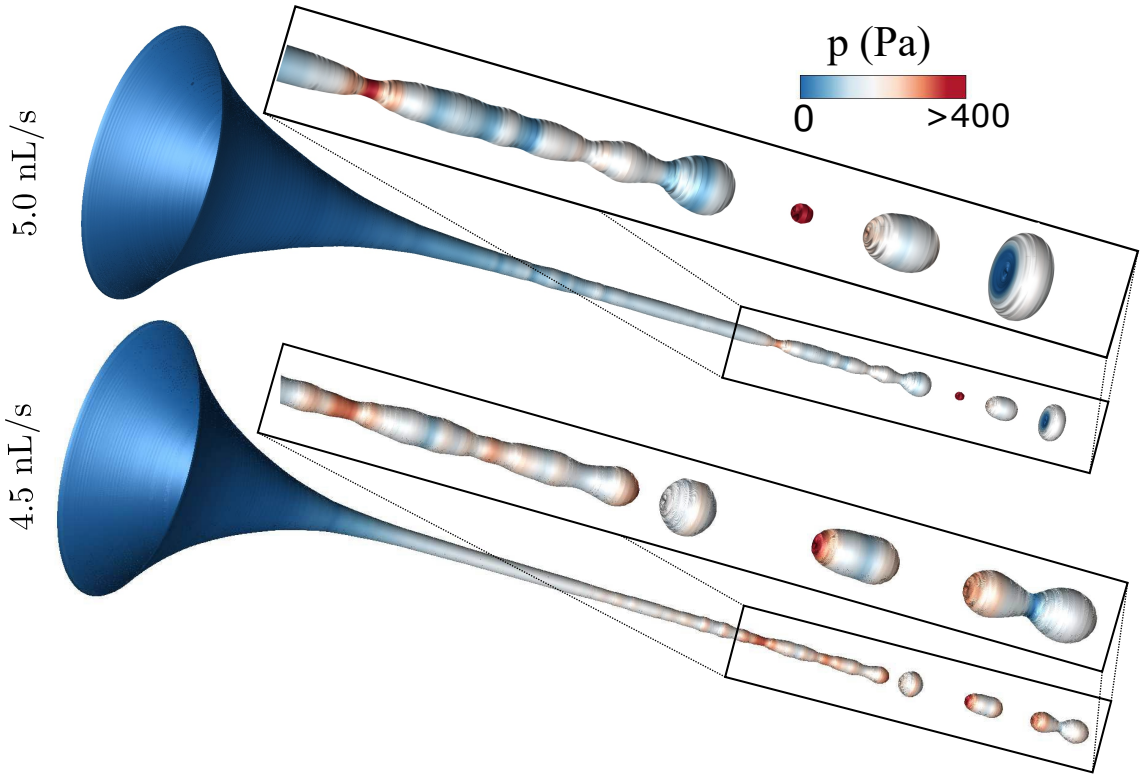


Figura 4.16: Distribuição da pressão ao longo da superfície livre do jato para dois caudais diferentes de entrada.

4.1.5 Análise no domínio da frequência

Para investigar o comportamento dinâmico do jato começamos por apresentar a dinâmica do jato fazendo uma análise espetral com a transformada de Fourier para extrair diretamente os dado mais relevantes. Podemos aqui examinar a flutuação do comprimento do jato contínuo de líquido e a flutuação da densidade de carga elétrica na saída do escoamento. Para captar o comportamento dinâmico do escoamento é importante ter uma frequência de amostragem, f_s, superior à frequência dominante do escoamento, assegurando assim a verificação do teorema da amostragem. Esta análise permite-nos assumir um escoamento estatisticamente estacionário, sendo que este escoamento é composto por uma média temporal e alguma flutuação.

As amostras são retiradas de passos de tempo fixos depois de a simulação atingir o estado estacionário cíclico que assumimos como *steady emission*. A figura mostra a transição do modo de emissão até atingir a emissão estável. A flutuação do comprimento do jato de líquido contínuo é calculada como $\tilde{L}_{\text{jet}} = L_{\text{jet}} - \overline{L}_{\text{jet}}$, em que $\overline{L}_{\text{jet}}$ é o valor médio ao longo do tempo de escoamento e L_{jet} o valor instantâneo. As amostras para o comprimento do jato foram recolhidas com uma frequência de amostragem f_s de 500 kHz.

A flutuação do jato $(L_1; ...; L_n)$, na região de emissão constante foi analisada por uma Transformada Rápida de Fourier (FFT) [122], de modo a encontrar as frequências $\hat{f}$ e os valores próprios $\lambda_i \bar{\lambda}_i = |\lambda_i|^2$. Uma vez que as medições são efetuadas com uma frequência de amostragem fixa f_s, os coeficientes temporais da FFT podem ser analisados no domínio da frequência com uma densidade espetral de potência (PSD) calculada como,

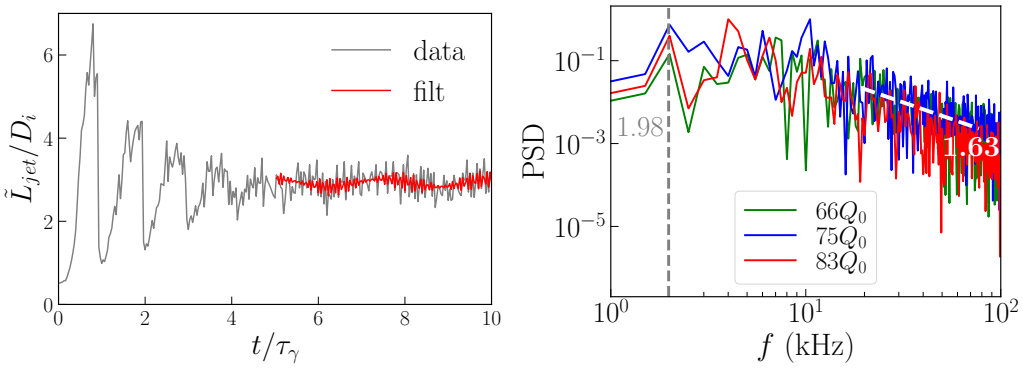


Figura 4.17: (esquerda) Flutuação do comprimento do jato, para um caudal de entrada igual a $83Q_0$. A cinzento representa-se o comprimento do jato contínuo e a vermelho os dados amostrados para as análises FFT. O f_{filt} é composto pelas seguintes frequências: $\{132{,}8; 333{,}3; 1032{,}0\}$Hz. (direita) Espectro PSD da flutuação de L_{jet} para diferentes caudais de entrada.

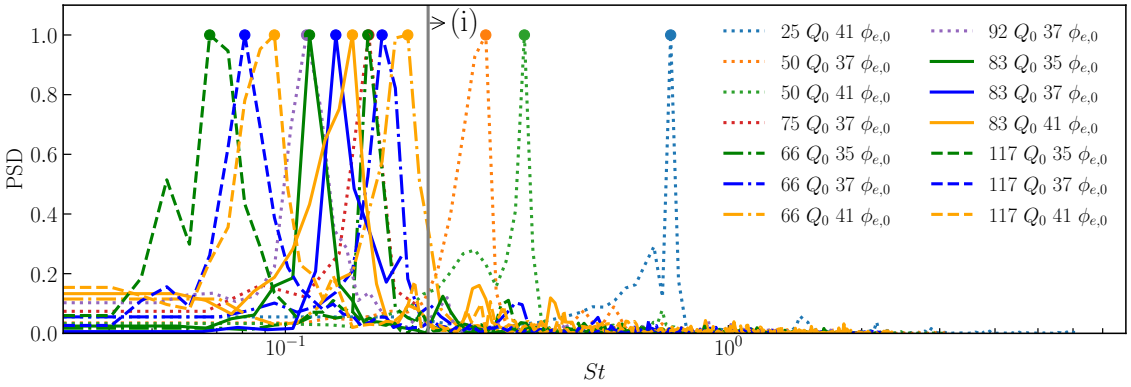
$$\text{PSD} = \frac{1}{n}\left|\sum_{i=1}^{n} a_i e^{-j2\pi f_s i/n}\right|. \quad (4.16)$$

Onde n é o número de amostras e a_i é o módulo da amostra. Os valores de PSD do $\hat{f}$ são normalizados pelo seu valor máximo. As frequências são então filtradas para $\left|\hat{f}\right|^2 > 0{,}95$, reconhecidas como sendo as frequências dominantes, f_{filt}. A linha vermelha na Figura 4.17 (esquerda) é a reconstrução do f_{filt}, do domínio de Fourier para o temporal.

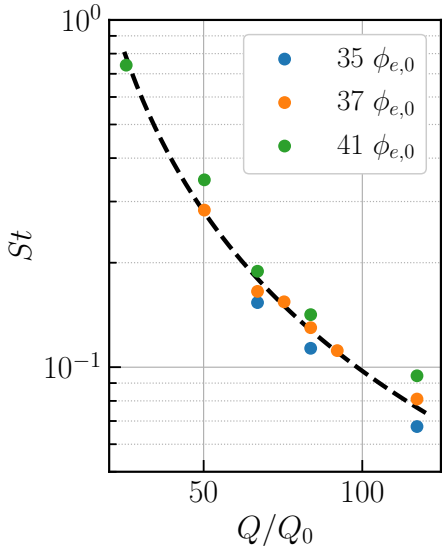
O número de Strouhal padrão, $St = fD_i/u_i$, não é aplicável neste tipo de escoamento porque surgem valores elevados devido ao grande aumento do campo de velocidade originado pela aceleração do campo elétrico, ou seja, da $O(1000)$. Em vez disso o número de Strouhal caraterístico é definido como $St = fd_0/u_i$. A velocidade é aqui baseada na aceleração do campo de escoamento médio, devido ao campo elétrico, como $u_i^E = \varepsilon_2 E_\infty^2 D_i/\mu_2$. A análise PSD mostra que as frequências dominantes para cada caudal $\{66, 75, 83\}Q_0$ são $\{4{,}00; 10{,}51; 11{,}51\}$ kHz. Uma frequência de $1{,}98$ kHz aparece em todas as linhas PSD e considera-se estar associada à geometria, ver Figura 4.17 (direita). Uma taxa de decaimento, definida como a diminuição do módulo das frequências do espetro PSD de 1,63 é mostrada para frequências acima de ≈ 20 kHz.

A influência do módulo do potencial elétrico aplicado ao bocal é muito pequena, conforme descrito por [7], onde o diâmetro da gota para diferentes campos elétricos aplicados, e o mesmo caudal de entrada, acabe por flutuar num intervalo $6 - 7\%$.

Utilizando os dados do sinal da Figura 4.17, no qual consta a flutuação da esquerda do jato, é possível determinar a relação entre as condições de funcionamento e a estabilidade do jato. Calculou-se o espetro PSD da flutuação do jato, para múltiplas condições de funcionamento diferentes, ver Figura 4.18b (esquerda). É possível observar que, para valores de caudal de entrada de 50% do Q_0 nominal, a frequência dominante começa a aumentar. Uma vez que a densidade de carga elétrica está extremamente ligada à dinâmica da interface analisamos também a flutuação de ρ_e. A flutuação é analisada a partir do valor médio na fronteira de saída. Neste tipo de cálculo a solução nos primeiros momentos



(a)



(b)

Figura 4.18: (a) PSD da flutuação do comprimento do jato para as diferentes condições de trabalho em função do número de Stroudal. Na região (i) forma-se um jato instável, misturado com um regime de imersão. (b) Frequência dominante da estabilidade do jato para as diferentes condições de funcionamento (a linha preta é uma curva de ajuste da lei de potência aos pontos de $37\phi_{e,0}$).

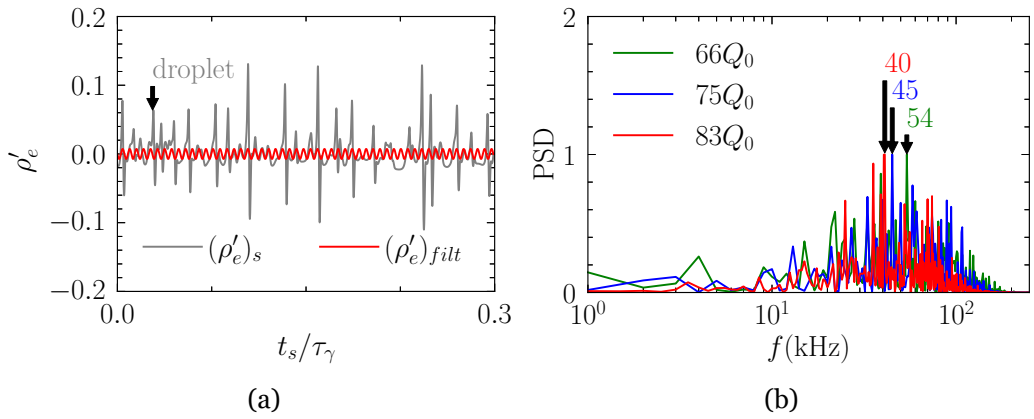


Figura 4.19: (a) Flutuação do valor médio da densidade de carga elétrica na saída, para o caso $37\phi_{e,0}$ e $83Q_0$. (b) PSD da flutuação ρ_e. Resultados para uma amostragem de $\approx 0{,}3(\Delta t_s \tau_\gamma)$ durante uma formação estável de um cone de Taylor e emissão de jato. A cinzento estão representados os dados em bruto e a vermelho os dados produzidos pela frequência dominante.

transientes $t/\tau < 1$ é altamente dependente da condição inicial e, portanto, não fornece precisão suficiente para obter um comportamento realista do escoamento nesse período de tempo. Devido a este facto, e de todo o sinal amostrado apenas a região de emissão estável é de interesse, em que Δt_s é o tempo de amostragem. Este tempo de amostragem tem de ser suficientemente grande para que a flutuação do jato possa ser devidamente captada. Escolhemos o caso de $83Q_0$ para determinar esta janela de tempo dado que, com a diminuição do caudal, as frequências aumentarão, como mostra a análise em frequência para os diferentes casos de teste. O sinal foi então tratado com uma FFT para determinar a frequência fundamental associada à emissão da gota. A flutuação do sinal amostrado, $(\rho'_e)_s$ e a flutuação fundamental, $(\rho'_e)_{filt}$, para o caso com $83Q_0$ é apresentada na Figura 4.19a.

A flutuação fundamental foi determinada por uma filtragem das frequências PSD, que é mostrada na Figura 4.19b. A diminuição do caudal de entrada resultou numa frequência maior da quebra do jato. Isto deve-se ao facto de, para o mesmo potencial elétrico, uma diminuição do caudal de entrada aumentar a instabilidade do jato.

4.1.6 Resumo

Para as condições testadas anteriormente verificou-se que a implementação do campo elétrico era válida. As equações de governo do campo elétrico discretizadas demonstraram ter uma precisão de ordem de 1. Esta ordem de precisão refere-se a um refinamento no espaço e no tempo. Outras melhorias no método numérico utilizado para discretizar estas equações podem ainda ser consideradas em investigações futuras, uma vez que é possível aumentar a ordem. O erro de discretização do campo elétrico no interior do escoamento é muito pequeno, sendo $\propto w_{\text{cells}}$. Em suma, um erro inferior a 1% na solução da pressão requer uma largura mínima de células $w_{\text{cells}} \approx 0{,}6\% D_H$. Para o campo elétrico temos uma relação de $w_{\text{cells}} \approx 5\% D_H$.

Este modelo apresenta um comportamento muito robusto e pode ser utilizado em qualquer aplicação onde ocorram escoamentos EHD não miscíveis. O modelo pode ser utili-

zado em três dimensões, pelo que será possível simular as zonas de funcionamento instável do jato do cone de Taylor. É necessário efetuar ainda mais estudos sobre as limitações do modelo, uma vez que as interfaces mais nítidas requerem uma malha com uma densidade muito elevada. A maior vantagem deste modelo VoF é a capacidade de simular qualquer geometria e qualquer escoamento EHD, sendo a única preocupação a discretização espacial do domínio computacional. Para além disso, podem ser simulados diferentes tipos de sistemas, sejam eles líquido-gás ou líquido-líquido.

Verificou-se que o tamanho da gota emitida pelo jato EHD tem uma distribuição normal, com o valor médio confirmado por medições experimentais na literatura [123]. O desvio relativo do diâmetro entre os resultados experimentais e os nossos resultados numéricos é de cerca de 1%. A sensibilidade destes resultados ao grau de refinamento da grelha foi medida e verificou-se que o desvio para o diâmetro das gotículas principais é inferior a $0{,}2\%$, quando o tamanho da malha (raio da célula) na região do jato é de $1{,}563\%$ do raio do bocal.

4.2 Instabilidades tridimensionais [3]

Os jactos eletrohidrodinâmicos (EHD) são uma tecnologia altamente promissora para a geração de estruturas tridimensionais à micro e à nanoescala, mas o avanço desta tecnologia é dificultado pela insuficiente compreensão de muitos aspetos dos seus mecanismos de escoamento, tais como o comportamento de *bending* sob potenciais elétricos maiores. Apresenta-se aqui uma simulação numérica totalmente acoplada do escoamento de jatos eletrohidrodinâmicos tridimensionais, uma vez que os efeitos não simétricos regem a maior parte dos regimes EHD. Ao impor valores de capilaridade elétrica elevada ($Ca_E > 0{,}25$), captamos instabilidades radiais que até agora nenhuma outra simulação numérica foi capaz de apresentar. Inicialmente é feita uma comparação com simulações bidimensionais de axissimétricos anteriores e posteriormente é feita uma validação com estudos experimentais do jato do cone de Taylor.
Conclui-se que se obteve um valor de precisão interessante, com um erro de cerca de 1,101% na morfologia em relação aos resultados experimentais. Além disso, o nosso modelo numérico leva em consideração o ângulo de contacto entre a superfície do bocal e líquido, que é apresentada porque é uma variável muito importante para melhorar a precisão da morfologia do cone de Taylor. Além diss, são estudadas as estruturas tridimensionais e a dinâmica do escoamento, sob diferentes números de capilaridade elétrico, e ainda da sua relação com as instabilidades do jato. Apresentamos ainda uma visualização inovadora da formação da geração de gotículas com cone de Taylor recuado e ainda a dinâmica de *bending*.

4.2.1 Introdução

A atomização por jato eletrohidrodinâmico tem sido um tópico científico de interesse em muitas áreas e desde há muitos anos. Uma vez que a miniaturização e o fabrico de estruturas tridimensionais micro/nanoscópicas multifuncionais se torna cada vez mais importantes para desenvolver muitas tecnologias [25], a tecnologia de jato EHD e a compreensão do seu escoamento podem ser muito úteis. A impressão por jato eletrohidrodinâmico ultrapassa as limitações dos sistemas de jato convencionais e oferece uma técnica eficiente para produzir gotículas/fragmentos líquidos de alta resolução, a partir de uma grande variedade de líquidos, impondo apenas um campo elétrico forte entre o bocal e o solo [125, 126, 15].
A maior parte da investigação sobre eletrosprays concentra-se na parte inicial do jato, com a formação do cone de Taylor e a quebra do jato primário (a região do cone-jato) sendo o alvo ou ainda na dinâmica das partículas de pulverização da pluma (na região da pluma de pulverização primária). As primeiras investigações que mencionaram esse problema usaram principalmente algoritmos baseados em métodos de elementos de con-

[3] Resultados baseados nos publicados em **S. Cândido** and J. C. Páscoa, "Dynamics of three-dimensional electrohydrodynamic instabilities on Taylor cone jets using a numerical approach", Physics of Fluids, 2023. [124]

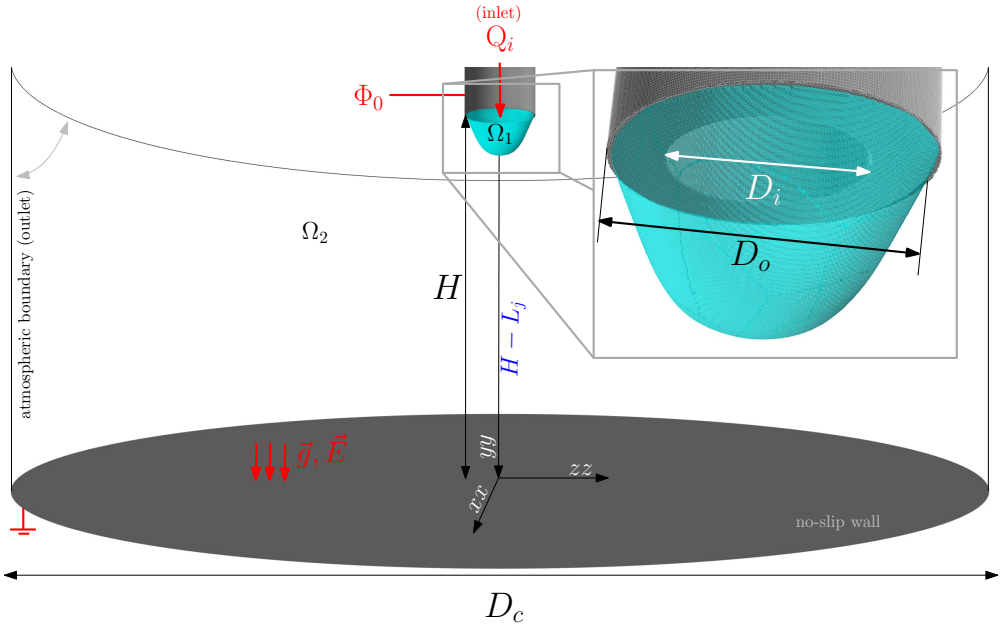


Figura 4.20: Esquema da montagem física, em que a parede do bocal capilar está a uma tensão elevada Φ em relação a um coletor de terra. Observa-se um olhar mais atento ao bocal capilar, mostrando um diâmetro interior (D_i) e um diâmetro exterior (D_o). A superfície azul representa a interface líquida.

torno (BEM) [125], Volume-of-Fluid (VoF) [48, 127, 46] e campo de fase [128, 129]. No segundo tipo a abordagem de partícula Lagrangiana e as leis do movimento de Newton são normalmente utilizadas para governar as trajetórias das partículas [61, 130, 10]. Estudos mais abrangentes mostram que as simulações tridimensionais são imprescindíveis para entender completamente os escoamentos gerados pelos efeitos EHD [131].

Até onde sabemos uma simulação numérica transiente e totalmente acoplada ao escoamento do jato EHD tridimensional nunca tinha sido realizada. Isso deve-se ao custo desses cálculos, onde um modelo totalmente tridimensional (3D) precisa de uma malha muito refinada para captar bem a interface do líquido, que é onde a carga elétrica é acumulada e tem um impacto profundo sobre o seu comportamento. Até agora os estudos de jatos EHD restringiu-se à condição de operação simétrica ao eixo [48]. Considera-se, no entanto, que o padrão complexo macroscópico e realista de um escoamento EHD monofásico só pode ser obtido com cálculos tridimensionais [131]. Isso foi observado em estudos sobre a deformação de gotículas líquidas devido ao campo elétrico externo [132, 133, 134] e a respetiva interação entre duas gotículas [135].

A formação de jatos de tipo eletrospray e *electrospinning* [42] é bem conhecida pela sua natureza multiescala, em que diferentes escalas estão em jogo. A ordem de grandeza da geometria é milimétrica, a ordem de grandeza do jato é tipicamente dez vezes menor e o diâmetro das gotículas pode ser cerca de 100 vezes menor do que o diâmetro do bocal capilar. Como resultado desta complexidade, a condição de simetria do eixo é assumida na maioria dos cálculos de simulação do escoamento EHD, e os autores tendem a ignorar as regiões instáveis perante este tipo de escoamento. A presente secção desta tese analisa a dinâmica dos modos de funcionamento instável do jato EHD.

4.2.2 Definição do problema tridimensional

As condições de fronteira para o problema são baseadas em casos previamente estudados, de modo a assegurar a adequada implementação do modelo que pretendemos validar [8, 136].

O bocal de entrada é definido como tendo um diâmetro interno D_i de $160\ \mu\mathrm{m}$ e um diâmetro externo D_0 de $260\ \mu\mathrm{m}$. O comprimento do bocal (L) é de $300\ \mu\mathrm{m}$. Este comprimento do bocal assegura um escoamento totalmente desenvolvido na ponta e evita a recirculação na entrada. A ponta do bocal é definida a uma distância fixa do coletor de terra de $H = 1{,}5\mathrm{mm}$. Para garantir a precisão do cálculo o coletor de solo tem um diâmetro $D_c = 5\ \mathrm{mm}$, permitindo assim que o escoamento se ajuste à dinâmica e não perturbe o jato.

As condições de fronteira impostas são maioritariamente iguais às condições do modelo axissimétrico. A diferença neste caso é que não existe furo de saída axial no coletor. Para garantir que as condições são as mesmas que as do caso de teste experimental e assegurar a comparação, a parede do coletor tem uma velocidade fixa de $\boldsymbol{u} = (-u_s, 0, 0)$, em que u_s é imposta como sendo a velocidade experimental do coletor de $20\ \mathrm{mm\,s^{-1}}$. Isto foi feito para cada cálculo, variando assim apenas uma condição, para uma melhor comparação da dinâmica do escoamento com a experimental. As condições de fronteira são então:

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = \Phi_0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_e, \quad (4.17)$$

$$\boldsymbol{u} = (-u_s, 0, 0), \qquad \phi_e = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_g, \quad (4.18)$$

$$\boldsymbol{u} = (0, u_{in}, 0), \quad \alpha = 1, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \phi_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_i, \quad (4.19)$$

$$p = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[\boldsymbol{u}, \alpha, \phi_e, \rho_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_f. \quad (4.20)$$

O fluido é gotejado do bocal a um caudal constante, Q_i, correspondente a uma velocidade de entrada $\mathbf{u}_{in} = Q_i/(\pi D_i^2/4)$. É aplicado um potencial elétrico fixo $\phi_e = \Phi_0$. Estes dois parâmetros são os que mais influenciam a estabilidade do cone de Taylor e a formação do jato.

A condição inicial para a fração de fase $\alpha = 1$ considera duas regiões, a região no interior do bocal de entrada dada por $\{x^2 + z^2 \leq (D_i/2)^2\} \forall y \in [-L, 0]$ e a região inicial da interface

$$\sum_0 : \{x^2 + y^2 + z^2 \leq (0.95 D_0/2)^2\}. \quad (4.21)$$

Esta última é restringida a $(0.95 D_0/2)$ para garantir que o líquido não se encontra no canto do bocal, uma vez que esta região tem uma elevada tensão elétrica e pode conduzir a soluções pouco razoáveis devido à possibilidade de modelar uma explosão de Coulomb.

Como discutiremos mais tarde o nosso modelo tem diferentes níveis de refinamento de malha. Para garantir uma elevada precisão na interface o nosso modelo utiliza malhas não uniformes para captou a interface com um tamanho de malha mínimo [137]. A malha tridimensionais contém células hexaédricas e hexaédricas-divididas com refinamento lo-

Tabela 4.4: Propriedades hidrodinâmicas e eléctricas dos fluidos [8].

Fase	μ (mPa s)	ε_r $(-)$	σ (S m^{-1})	ρ (kg m^{-3})	γ (N m^{-1})
Liquido (Ω_1)	60.00	55.6	60×10^{-6}	1208.4	0.0645
Ar (Ω_2)	0.0120	1.0	1.0×10^{-15}	1.225	–

cal. Isto é particularmente relevante quando temos escalas tão diferentes em jogo, como por exemplo o tamanho do domínio e o diâmetro do jato.
A solução líquida usado nos cálculos é uma mistura de glicerol, água e cloreto de sódio (NaCl), cujas propriedades físicas e elétricas são dadas na Tabela 4.4 [8].
A molhabilidade da parede é uma condição de fronteira necessária para este tipo de escoamentos (escoamentos capilares). Uma parede hidrofílica (ângulo de contacto baixo) promove o espalhamento do líquido, enquanto uma parede hidrofóbica (ângulo de contacto elevado) cria uma gotícula de líquido mais compacta [138]. No nosso trabalho, a molhabilidade das paredes antiderrapantes (bocal do elétrodo e placa de massa) é controlada por um ângulo de contacto estático θ_s, que se relaciona com as equações de Young
,

$$\cos\theta_s = \frac{\gamma_{wc} - \gamma_{wd}}{\gamma}, \quad (4.22)$$

onde γ_{wc} é a tensão superficial da fase contínua da superfície (ar) e γ_{wl} a tensão superficial da superfície-líquido. Todas as simulações foram realizadas com um ângulo de contacto de 51° para as paredes antiderrapantes.

4.2.3 Validação do modelo

O primeiro passo do nosso trabalho consiste em validar os resultados numéricos utilizando os resultados experimentais, a fim de estudar a fiabilidade do modelo numérico. Esta validação é efetuada através de um teste de sensibilidade da malha e de uma comparação da morfologia do cone de Taylor calculado. Esta secção de validação é muito importante porque, para o modelo utilizado, a resolução da interface é muito exigente quanto à precisão da densidade de carga elétrica. Os resultados são comparados com trabalhos experimentais anteriores em [8] e resultados numéricos de [136].
As condições de trabalho para os testes de validação são mantidas constantes. O potencial elétrico no bocal capilar é $\Phi_0 = 2{,}18$ kV e o caudal de entrada é $Q_i = 16{,}1$ nL s^{-1}. É definido um importante grupo adimensional, o capilar elétrico Ca_E, que permite caraterizar escoamentos de superfície livre que são regidos, principalmente, pelas condições do campo elétrico externo aplicado e pela tensão superficial, sendo esta última elevada devido às dimensões capilares do bocal ($\mathcal{O}1$ µm) [85]. O Ca_E é assim definido como,

$$Ca_E = \frac{\varepsilon_0 D_i E_0^2}{\gamma}. \quad (4.23)$$

Em capilares elétricos se $< 0{,}1$ não há formação de jato, já numa gama de $\approx [0{,}1, 0{,}5]$ ocorre a formação de jato, transitando de uma emissão estável de gotículas, para uma deposição contínua de jato e, finalmente, passando ao regime de *bending* de jato [139, 40, 136]. A valores $> 0{,}5$ forma-se um grande estiramento elétrico na superfície, enquanto o componente viscoso é muito menor e, assim, o cone de Taylor cria múltiplos jatos que seguirão o campo elétrico aplicado. Os dois últimos regimes serão observados na próxima secção. Nesta altura apenas nos concentramos num valor de Ca_E igual a $0{,}25$ para efeitos de validação.

Além do número de capilaridade elétrico também o caudal de entrada tem um grande impacto na estabilidade do jato [7]. Assim, definimos o número de Weber elétrico We_E,

$$\mathrm{We}_E = \frac{Q_i}{Q_0} = Q_i \frac{\rho\sigma}{\varepsilon_0 \gamma}. \quad (4.24)$$

O Q_0 é o caudal de entrada mínimo para obter um regime estável de jato cónico, baseado em estudos experimentais obtidos para diferentes líquidos [7, 140]. Uma vez que apenas dispomos de um único conjunto de propriedades do líquido, o nosso número de Weber elétrico para todos os cálculos é de $20{,}4$.

Uma escala importante a ser considerada é a escala de tempo da tensão superficial hidrodinâmica, dada por $\tau_h = \sqrt{\rho_1 D_i^3/\gamma}$ [141]. Esta escala de tempo é a escala relevante para escoamentos de líquidos capilares e, por isso, está diretamente relacionada com o nosso tipo de escoamento atual. Outro número importante é o número de Weber hidrodinâmico, dado por $\mathrm{We} = \rho u_d^2 D_d \gamma^{-1}$, e que é definido para as gotículas de líquido geradas que têm um diâmetro D_d e viaja uma velocidade u_d [142].

4.2.3.1 Sensibilidade da malha

Para validar o modelo é necessário efetuar primeiro um teste de sensibilidade e comparar a morfologia do cone de Taylor com resultados experimentais e também com outros resultados numéricos. Note-se que os resultados numéricos anteriormente disponíveis na literatura nunca consideraram os efeitos tridimensionais completos. O domínio de cálculo é discretizado apresentada na Figura 4.21. Este é refinado de modo a obter uma malha muito fina na região do bocal, que é onde se formará o jato de líquido. Como podemos ver na figura, existem três regiões de refinamento: a zona mais refinada, a zona distante e uma camada tampão que separa as duas últimas. A região mais refinada é a região do bocal, contendo o bocal e o espaço de ligação ao coletor, é uma região cilíndrica ao longo de todo o eixo y com um diâmetro de $1.2D_0$. A malha menos refinada está afastada do bocal em $2D_0$. Entre estas duas regiões existe a região de transição entre os dois níveis de refinamento, a zona mais refinada é $\times 5$ mais refinada que a região exterior. É importante salientar que entre cada camada de transição de refinamento existem duas células de malha. Foram testadas quatro malhas diferentes, do tamanho mínimo da malha em valores de $\delta x : \{4{,}00; 3{,}08; 2{,}50; 2{,}02\}$ µm.

A Figura 4.22 mostra a sensibilidade dos resultados à malha. Embora o tamanho mínimo

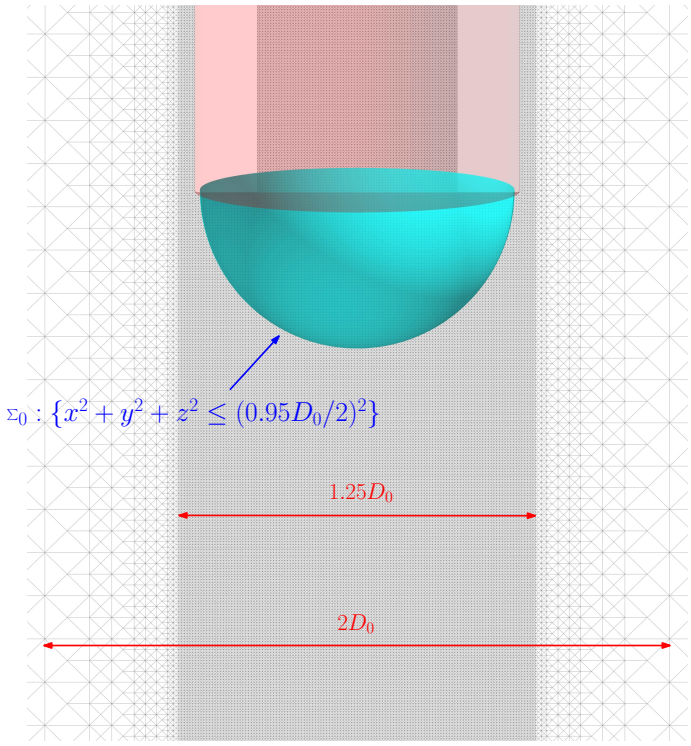


Figura 4.21: (a) Malha computacional num plano de corte YoZ. (b) Representa-se a azul a condição inicial para a interface $\sum_0$ e a vermelho o bocal de entrada.

da malha varie apenas $0{,}5$ µm, e isto representa 3% de D_i e cerca de 30% do diâmetro do jato. Uma vez que se trata de uma geometria totalmente tridimensional, o aumento do número de células da malha com $\delta_x = 3{,}0$ µm para a malha com $\delta_x = 2{,}0$ µm é de 4M células para 11M células, o que mostra como um aumento de apenas 1 µm representa um grande custo computacional. Também foi testada uma malha de $\delta_x = 4{,}0$ µm, embora este não tenha produzido resultados significativamente diferentes, uma vez que não houve formação de jato. A morfologia do cone de Taylor é a caraterística mais importante neste tipo de escoamento. Como podemos observar a curvatura do cone de Taylor para estes três espaçamentos de malha é idêntica, a alteração mais significativa é, ainda assim, no jato emitido. A malha com $\delta_x = 3.0$ não consegue produzir um jato estável como deveria acontecer, mas as outras duas dão uma solução muito próxima e são coerentes com os resultados experimentais.

Estes valores típicos de densidade de malha foram sugeridos por estudos anteriores que utilizaram a mesma abordagem para resolver o escoamento EHD, embora tenham utilizado uma metodologia apenas axissimétrica, como mencionado anteriormente. A malha com $\delta x = 4{,}00$ foi excluída de qualquer comparação porque não gerou sequer uma condição de jato. O tamanho ótimo de malha considerado foi o de $\delta x = 2{,}00$, pois houve uma convergência da morfologia do cone de Taylor como será discutido adiante. Todas essas considerações podem ser observadas na Figura 4.21, que mostra a malha final. A malha final utilizada é composta por $\approx$ 11M células.

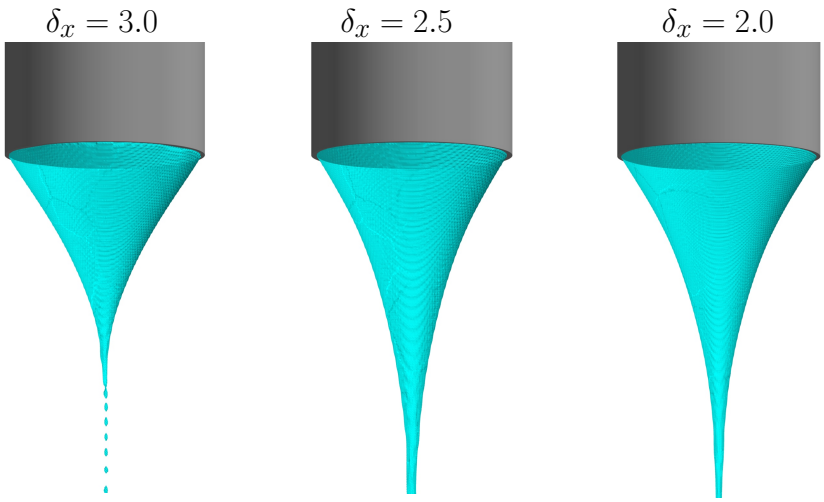


Figura 4.22: Resultados dos estudos de sensibilidade da malha. Comparação da isosuperfície para diferentes resoluções da malha δ_x [µm], resultados representados para o tempo $t = 0{,}7$ ms.

4.2.3.2 Validação morfológica do Cone de Taylor

É agora analisada uma comparação entre os resultados obtidos para a zona da superfície livre por outros autores e o nosso modelo numérico. Estes resultados são representados como instantes da formação do cone de Taylor, induzindo a formação do jato e a recessão do cone. Para uma melhor comparação os resultados foram comparados apenas para um valor de $\alpha = 0{,}5$, ou seja, a isosuperfície do líquido. Os resultados são mostrados na Figura 4.23, e mostram uma excelente previsão da formação do cone de Taylor. As linhas das imagens foram transpostas de modo a comparar corretamente a forma do cone. Os resultados mostram uma melhoria na comparação entre as curvas tracejadas numéricas atuais as do modelo axissimétrico e as experimentais. É importante notar que o líquido, como mostram os resultados experimentais, tende a molhar o bocal. Se isso não acontecesse, a forma do cone não corresponderia ao comportamento real, como mostramos. O tempo dos instantes de resultados é normalizado de forma a sincronizar-lo com os resultados, uma vez que a condição inicial produz uma variação da dinâmica inicial. Esta normalização consiste em colocar o valor $t = 0{,}4$ ms para o instante do comprimento máximo do cone, mas sem a emissão do jato. Para validação, os outros tempos devem todos estar sincronizados, como se pode ver nas imagens instantâneas. Calculando o volume do líquido como $V = \sum \pi x^2_{\alpha=0{,}5}$ para os valores de $y \in [0, y_{tip}]$, obtemos o erro de morfologia, dado como $\varepsilon_r = (V_{num} - V_{exp})V^{-1}_{exp}$. Para os tempos de $t : \{0{,}0; 0{,}4; 0{,}7; 0{,}8; 0{,}9\}$ ms o erro relativo foi de $\varepsilon_r : \{1{,}97; 0{,}747; -1{,}44; -0{,}395; -0{,}948\}\%$, respetivamente. Repare-se que os valores negativos significam que o volume é inferior ao experimental. Isto dá um erro médio de cerca de $1{,}101\%$, que é significativamente inferior aos 22% calculados para as curvas do cálculo numérico axissimétrico anterior [136].
Além disso, em [136] utilizaram a mesma ordem de grandeza para o tamanho da malha, e mostraram que um $\delta x = 1{,}6$ a $2{,}0$ µm não produz uma diferença significativa nos resultados. Embora eles tenham usado um VoF algébrico puro, como mostrado noutros estudos [143, 144], o uso do esquema de advecção geométrica para a interface reduz a propagação da interface dentro das células. Em comparação, se usássemos o esquema algébrico

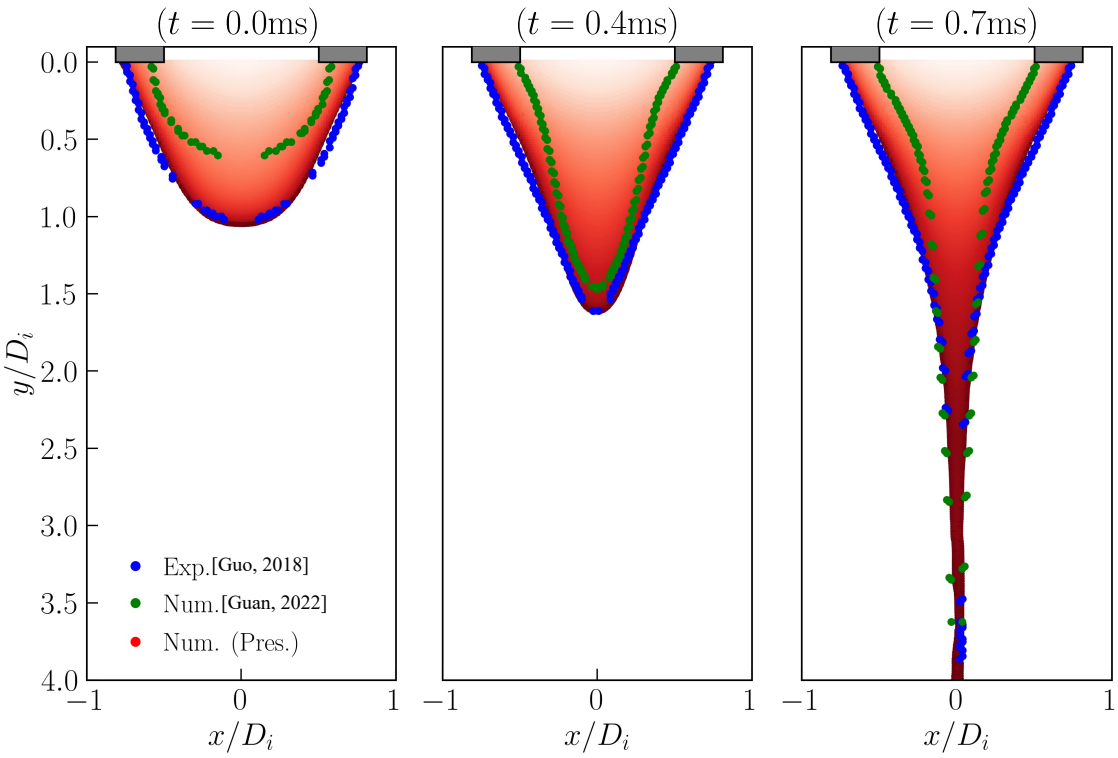


Figura 4.23: Comparação entre a superfície livre do líquido obtida com os nossos cálculos e os estudos anteriores para validação do modelo EHD. Nos nossos resultados, os pontos da superfície são coloridos pela coordenada do ponto no eixo z.

VoF, precisaríamos do dobro de células para atingir o mesmo nível de nitidez da interface [101]. Com isso podemos afirmar que a independência do tamanho da malha é coerente com os estudos anteriores, o que reforça validação do modelo. Além disso, nos próximos resultados, observaremos a dinâmica temporal e a emissão de gotículas as quais também são coerentes com os resultados experimentais.

4.2.4 Resultados e discussão

Com o nosso modelo numérico validado, vamos agora explorar as condições de funcionamento para um número de capilaridade elétrico mais elevado e observar a previsão de instabilidades do jato líquido, tais como a formação de efeitos de chicote. O objetivo aqui é verificar se a dinâmica do escoamento é reproduzida no modelo desenvolvido.

4.2.4.1 Dinâmica temporal

A forma do cone de Taylor e do jato líquido depende das forças que atuam no campo de escoamento e da sua dinâmica temporal. Como mencionado, os cálculos são realizados usando um passo de tempo adaptativo, com o passo de tempo mínimo selecionado de entre uma condição de Courant de 0,1 e a relaxação elétrica τ_e. Isto significa que, quando realizámos a sensibilidade da grelha, estávamos a refinar a resolução espacial e também a resolução temporal, uma vez que a condição de Courant depende do tamanho da célula da malha. Agora vamos avaliar a dinâmica temporal da solução, analisando a evolução da

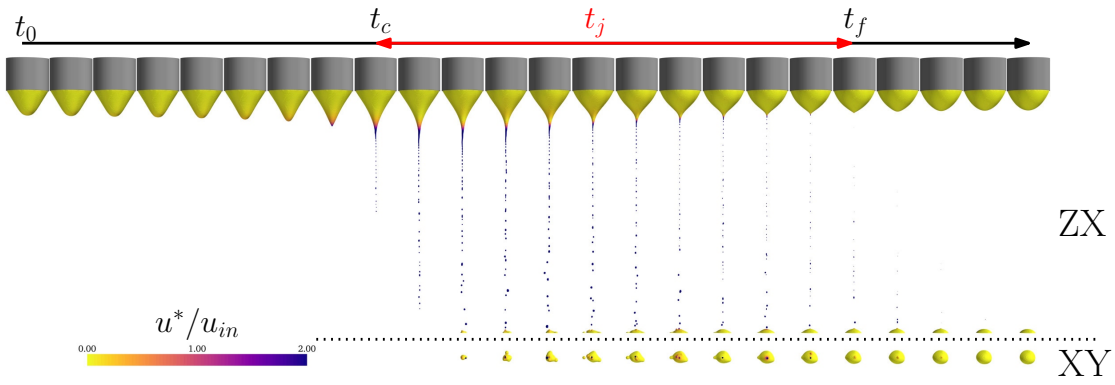


Figura 4.24: Uma sequência temporal da superfície iso 3D ($\alpha = 0{,}5$) num plano de visualização xy. A superfície é colorida pela velocidade u^*/u_{in}, onde o módulo da velocidade u é multiplicado por $u^* = 1000u$.

fase líquida ao longo do tempo.

A Figura 4.24 mostra a evolução temporal da solução 3D do jato para as condições de validação com $Ca_E = 0{,}25$. A figura mostra a superfície livre do líquido colorida pelo módulo da velocidade. Aqui observamos que, mesmo nesta condição de baixo Ca_E, as gotículas têm um comportamento não simétrico (veja as gotículas na região vermelha). Aqui também definimos algumas marcas temporais importantes. O tempo t_c é o ponto de partida da emissão com fim em t_f, dando um tempo de jato de t_j. O tempo t_0 não é a condição inicial, mas o tempo em que o líquido está em equilíbrio de forças, o que significa que a velocidade de toda a interface é zero. O tempo antes de t_0 é uma zona de recuo, em que a ponta do líquido sobe (no sentido oposto ao do campo $\boldsymbol{E}$) devido à estabilização do ângulo de contacto do líquido com o bocal, pelo que estes primeiros passos de tempo são descartados, uma vez que variam em relação à condição inicial. No entanto, para garantir que este é um verdadeiro t_0 o cálculo termina quando esta mesma forma é repetida, confirmando uma boa solução, não dependente da condição inicial.

A Figura4.25 mostra a evolução da ponta, ΔL_t, e o centróide da fase líquida, ΔL_c, no domínio. Este Δ é definido como a diferença entre a posição axial da interface quando comparada com a condição inicial de $\sum_0$. A evolução da ponta do líquido permite-nos determinar o ponto de formação do cone, o início da ejeção e as coordenadas axiais médias/médias da fase líquida que nos dão a estabilização do jato. Note-se que introduzimos uma região a t_r, esta região é o tempo de recuo e a região cinzenta no gráfico representa as regiões onde a velocidade está a recuar (no sentido negativo do eixo). A zona inicial deste comportamento de recuo deve-se ao relaxamento da tensão superficial, o que significa que a força na parede se deve à estabilização do contacto do líquido com a parede e ao equilíbrio entre todas as forças. Durante este tempo as cargas eléctricas acumulam-se na interface e inicia-se o processo de jato.

Repare que o tempo de jato t_j é apresentado na Figura 4.25 com um intervalo indicado por uma seta e, em baixo, existe o mesmo intervalo de comprimento. O primeiro é o tempo de jato do ponto de vista da emissão do cone, e o segundo é o tempo de jato do ponto de vista da placa de terra. O atraso do segundo é apenas o tempo de voo da fase líquida. O tempo t_r é retirado dos cálculos das condições de trabalho posteriores, sendo o nosso t_0. O t_0 foi definido como um relaxamento hidrodinâmico temporal antes da ponta máxima

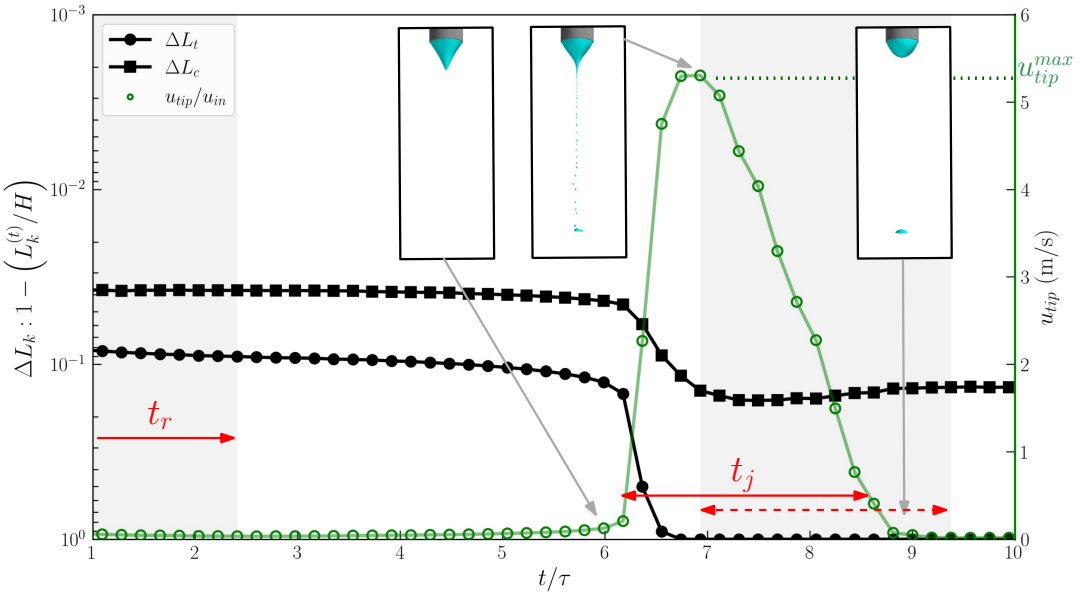


Figura 4.25: Evolução da variação da posição axial da ponta (ΔL_t) e do centróide da fase líquida (ΔL_c) no domínio do líquido, desde a condição inicial até à deposição no solo (preto). Evolução da velocidade na ponta do líquido (verde).

do cone de Taylor t_c.

4.2.4.2 Ejeção singular

Para as condições anteriores, uma gota é ejetada do jato r acaba por formar uma deposição no coletor. A forma desta gota é também comparada com os resultados experimentais. Nos resultados experimentais os autores mostram que as gotículas, depositadas no coleto, têm um ângulo de contacto com a superfície de $\theta_s = 50{,}9°$. A partir dos nossos resultados numéricos podemos observar que a deposição de gotículas ejetadas, na Figura 4.26, tem exatamente o mesmo ângulo de contacto. Isto foi assegurado impondo a condição de fronteira de ângulo de contacto constante na parede da placa de terra, definida para um ângulo de $\theta_s = 51°$. No entanto vale a pena notar que a gota no coletor está sujeita ao vento iónico, que podemos observar a partir do padrão instantâneo das linhas de corrente do campo vetorial da velocidade, e também à força eletrostática, que podemos observar a partir do padrão instantâneo das linhas de corrente mostrado na mesma figura.
Focando agora o padrão instantâneo das linhas de corrente dos campos vetoriais, nomeadamente a velocidade e o campo elétrico da Figura 4.26, a largura das linhas é proporcional ao módulo do campo nesse ponto. Note-se que, para ambos os campos, o módulo do campo vetorial no interior da gota é proporcionalmente muito pequeno quando comparado com o do exterior. O campo elétrico no interior da gota é muito pequeno devido à condutividade do líquido, que é muito maior do que a do ar. Além disso, a figura também mostra a densidade da carga elétrica, que, como vemos, está concentrada na interface, o que resulta do modelo dielétrico com fugas utilizado. No entanto, é interessante notar que se trata de uma concentração de cargas negativas. Mas curiosamente, o jato do cone de Taylor tem uma carga positiva dominante na interface, ver a Figura 4.25, mas, quando a

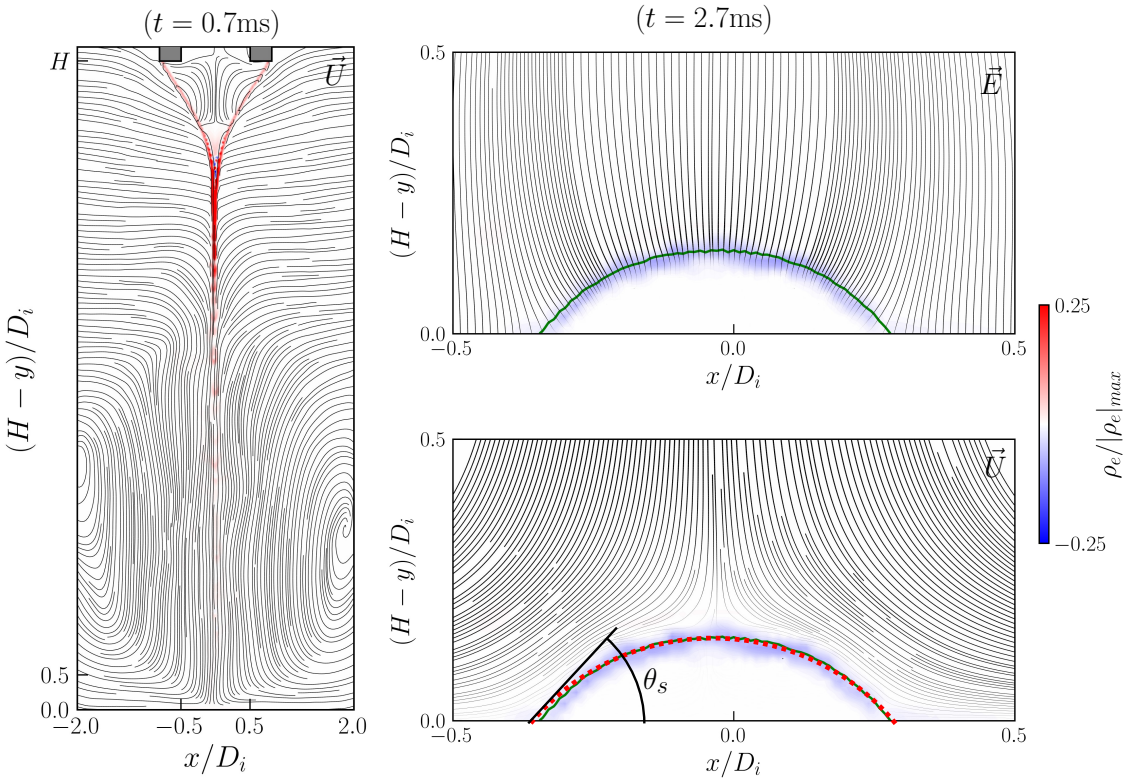


Figura 4.26: Visualização do padrão instantâneo das linhas de corrente para (esquerda) a velocidade para a emissão do jato cónico ($t = 0{,}7$ ms) e (direita-acima) o campo elétrico e (direita-baixo) o campo de velocidade na região da gota ($t = 2{,}7$ ms $= 10\tau_h$) . Para as duas imagens da direita a largura das linhas é proporcional ao módulo do respetivo campo assinalado em cada. A linha vermelha quebrada é a forma da gota da imagem do estudo experimental (figura 1 (c) de [8]).

fase líquida toca na placa de terra, as cargas tornam-se negativas, garantindo a conservação da carga. É possível ver que a gota não está centrada. Isto deve-se à condição da placa móvel. Com estes resultados constatamos que o ângulo de contacto da gota com o coletor é bem imposto, validando assim o nosso modelo.
O campo elétrico acelera as cargas elétricas na superfície do líquido nas direções axial (y) e radial (x,z). Este campo elétrico pode ser representado pelo padrão instantâneo das linhas de corrente do campo. No entanto, uma vez que a solução líquida é baseado num fluido dielétrico com fugas, as cargas elétricas sofrerão convecção a partir da superfície livre e viajarão em todo o domínio do escoamento. Se o líquido não se deslocar tão rapidamente como a carga elétrica, esta saturará a região e deslocar-se-á na direção radial. Isto cria um comportamento não-simétrico e pode levar à criação de ondas no jato de líquido. Veremos isto mais adiante a acontecer em condições de Ca_E mais elevadas.

4.2.4.3 Efeito do potencial elétrico

O caso anterior, de $Ca_E = 0{,}25$, referia-se a uma condição de funcionamento muito estável e com emissão de uma única gota. Conforme relatado num estudo experimental para este caso, mesmo com um ligeiro aumento do número de capilaridade elétrico para $Ca_E = 0{,}26$, haverá gotículas não simétricas geradas em torno da gota principal emitida.
O aumento do potencial elétrico aumentará a corrente elétrica e o jato de líquido, bem como a densidade máxima de carga elétrica, de modo a manter o jato estável. Isto irá induzir instabilidades radiais que até agora nenhuma outra simulação numérica captou. A Figura 4.27 mostra a evolução temporal do jato de líquido para um número de capilaridade elétrico de $Ca_E \in \{0{,}26; 0{,}32; 0{,}38; 0{,}42\}$. Isto representa um aumento, em relação à condição de trabalho anterior, de 4%, 28%, 52% e 65%, respetivamente. Como observado a partir da velocidade da ponta, o aumento do potencial elétrico não permite que o jato de líquido recue completamente. Isto significa que há uma emissão principal de líquido, durante t_j, que tem uma morfologia como a representada na imagem (i) e, após este tempo, o cone de Taylor recua e forma-se um pequeno jato que emite pequenas gotículas, ver imagem (ii). Esta é a razão pela qual, para um potencial elétrico maior, existem pequenas gotículas ao redor da emissão principal, que foram também identificadas nos resultados experimentais [8]. Além disso, o potencial elétrico aumenta a velocidade máxima, como é normal, mas diminui o t_c quando aumentamos a força volumétrica elétrica, ver Figura 4.28.
Com um aumento do potencial elétrico, o tempo para a formação do cone de Taylor na ejeção é reduzido. A Figura 4.28 mostra o perfil de velocidade da superfície livre do líquido. Como podemos observar, para o mesmo tempo de escoamento $t = 0{,}4\tau_h$, a força do jato é maior com um potencial elétrico maior. No entanto vemos que de alguma forma, há uma convergência do perfil de velocidade, o que significa que o perfil de velocidade do cone de Taylor permanecerá estável e o que mudará é a emissão do jato.
A corrente elétrica i_e é agora calculada como $i_e = \int_S \rho_e U \cdot n \, dS$, em que S é a superfície da secção transversal do jato de líquido, n é o vetor normal à superfície, ρ_e é a densidade de carga e u é a velocidade do líquido, ver Figura 4.29. A secção transversal S foi fixada

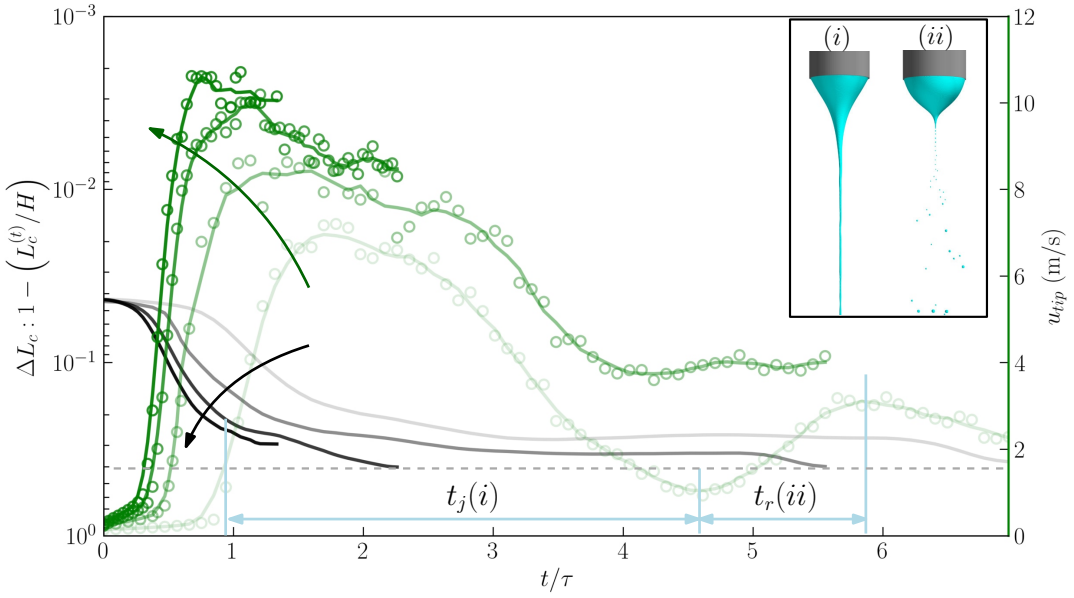


Figura 4.27: Variação da evolução temporal da velocidade (verde) da ponta da fase líquida com um aumento do potencial elétrico $Ca_E \in \{0{,}26; 0{,}32; 0{,}38; 0{,}42\}$ (na direção das setas) e (preto) da altura média do líquido, para os potenciais elétricos correspondentes. São apresentados dois instantâneos da isosuperfície (i) e (ii) para demonstrar o tipo de comportamento nas duas regiões, a região de jato t_j e a região de recuo t_r.

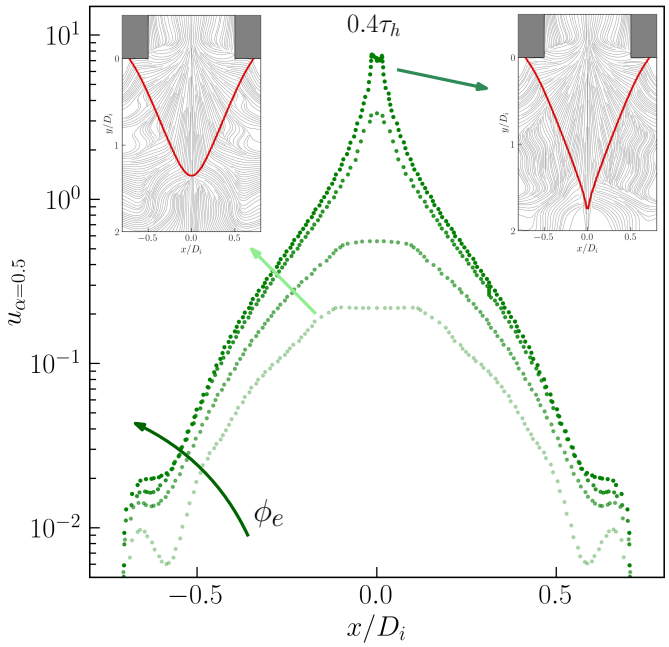


Figura 4.28: Variação do perfil de velocidade da superfície com um aumento do potencial elétrico $Ca_E \in \{0{,}26; 0{,}32; 0{,}38; 0{,}42\}$ (na direção da seta curva). Na parte superior as duas figuras representam o padrão instantâneo das linhas de corrente do campo de velocidade e, a vermelho, a isocurva da interface. A comparação é feita para o mesmo tempo de escoamento de $t = 0{,}4\tau_h$.

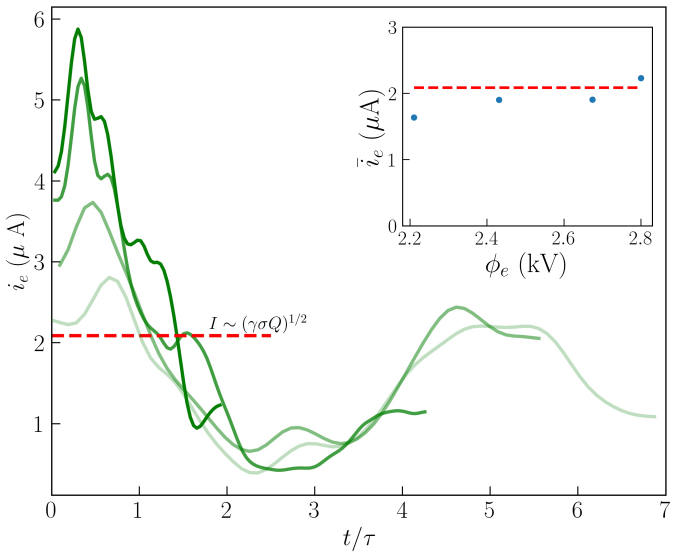


Figura 4.29: Efeito do potencial elétrico externo aplicado na corrente elétrica do jato, para o mesmo Ca_E que anteriormente.

a meio do domínio, comprovando a informação correta da corrente que atravessa o jato de líquido. Como observamos na dinâmica da corrente elétrica, esta aumenta ao mesmo tempo que o tempo de jato (compare com na Figura 4.27). Estes valores de corrente elétrica são comparados com a linha vermelha, que mostra a lei de escala para a corrente de pulverização, que é definida como $I \sim (\gamma\sigma Q)^{1/2}$ [40]. Podemos observar um ligeiro aumento da corrente elétrica máxima, atingindo o pico na ejeção, mas a média não é influenciada. Ao aumentar o potencial elétrico a intensidade do campo elétrico em torno do emissor irá aumentar, o que pode aumentar a força sobre as gotículas carregadas e fazer com que estas se movam mais rapidamente, levando a um aumento da corrente elétrica. No entanto, como demonstraram estudos experimentais anteriores, o aumento do potencial elétrico tem pouco efeito na corrente elétrica, pelo que não é possível estabelecer uma correlação entre o aumento da instabilidade e o aumento da corrente elétrica [86, 145]. De facto, observando a relação entre o regime (jato estável ou instável) e as leis de escala da corrente elétrica, é o caudal de entrada que mais afeta a corrente elétrica [40].

Os próximos resultados serão divididos entre a análise de um caso em que há emissão de cone de Taylor recuado, caso com $Ca_E = 0{,}26$, e outro em que há emissão de cone de Taylor sem paragem, caso com $Ca_E = 0{,}38$. Considerando, portanto, dois tipos de instabilidade, e ainda o tipo de dispersão de gotas e também o efeito de chicote do jato líquido.

4.2.4.4 Formação de gotas satélite

Vamos agora tratar o no caso com $Ca_E = 0{,}26$, e apresenta-se na Figura 4.30 a evolução do jato líquido em instantes dentro do tempo de jato. Nesta condição de operação observamos um comportamento completamente não simétrico do jato líquido, existem pequenas janelas onde o líquido se deposita de forma estável, como mostra o tempo $1{,}9\tau_h$, e estas duram cerca de $0{,}5\tau_h$. Fora desta janela, o jato é instável. De $2{,}2\tau_h$ a $2{,}8\tau_h$ o cone de Taylor

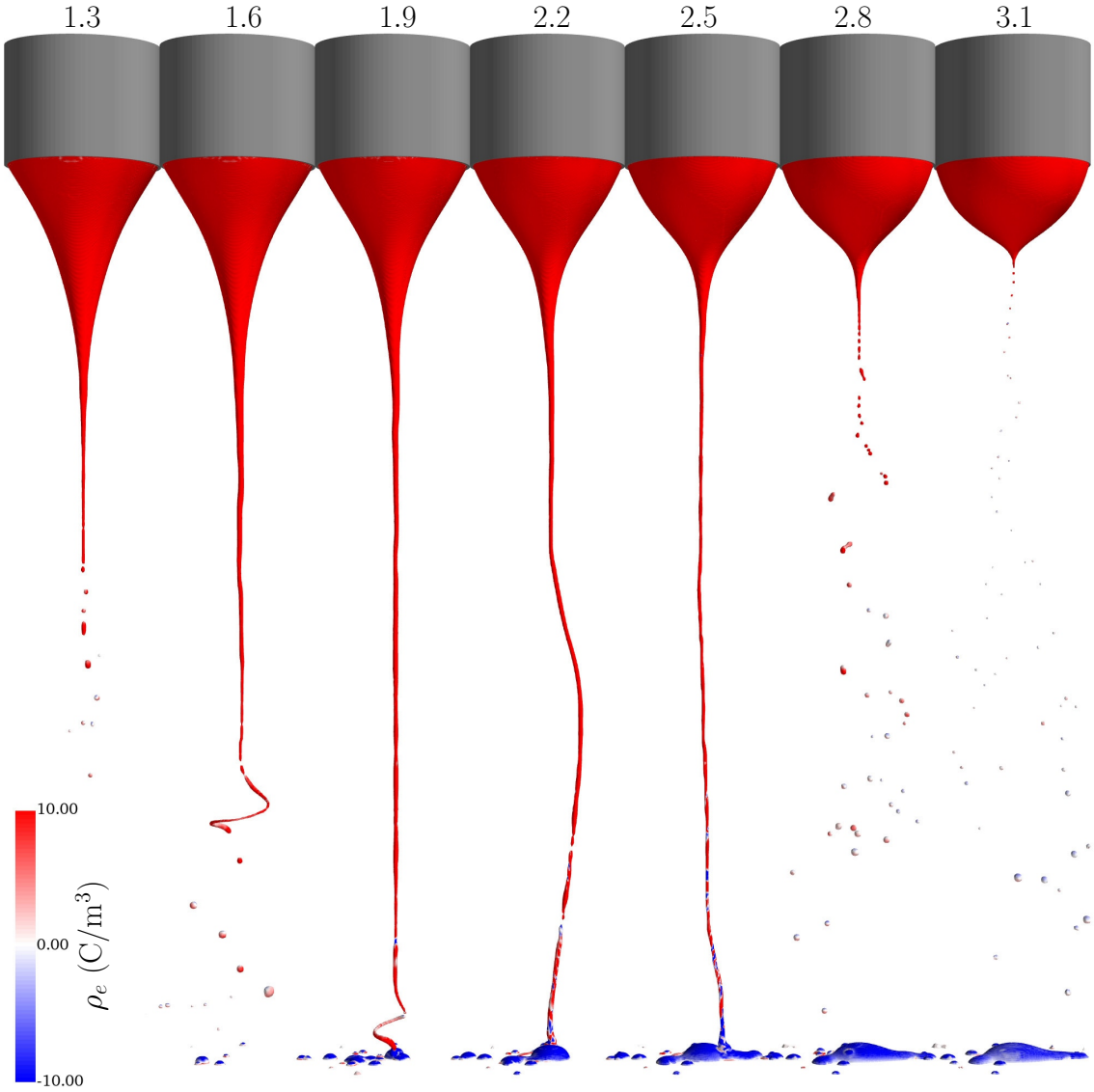


Figura 4.30: Evolução temporal do jato, para o tempo de ejeção, colorido pela densidade da carga elétrica.

recua com um efeito radial que corresponde ao efeito de chicote do líquido. Após o recuo do cone de Taylor permanece ainda um pequeno jato que emite gotículas muito pequenas. Estas pequenas gotas têm, para esta condição de trabalho, um diâmetro médio de $3{,}96\mu\mathrm{m}$, que foi determinado utilizando uma distribuição normal dos diâmetros medidos para as gotas. Além disso, estas gotículas têm uma velocidade média de voo de $4{,}97\,\mathrm{m\,s^{-1}}$, resultando assim num número de Weber hidrodinâmico médio de $1{,}35$. Isto indica que o transporte das gotículas é feito numa quebra vibracional, o que reforça a convicção de que o nosso regime de cálculo pode ser aplicado porque não há quebra turbulenta do domínio fluido.

A Figura 4.30 também mostra a distribuição da densidade da carga elétrica. As cargas elétricas positivas são acumuladas no jato do cone de Taylor até ao momento da rutura. Os segmentos líquidos que se desprenderam do jato principal têm uma região de acumulação de carga elétrica negativa e outra positiva.

Como já foi referido a carga elétrica acumula-se na interface, embora, devido à satura-

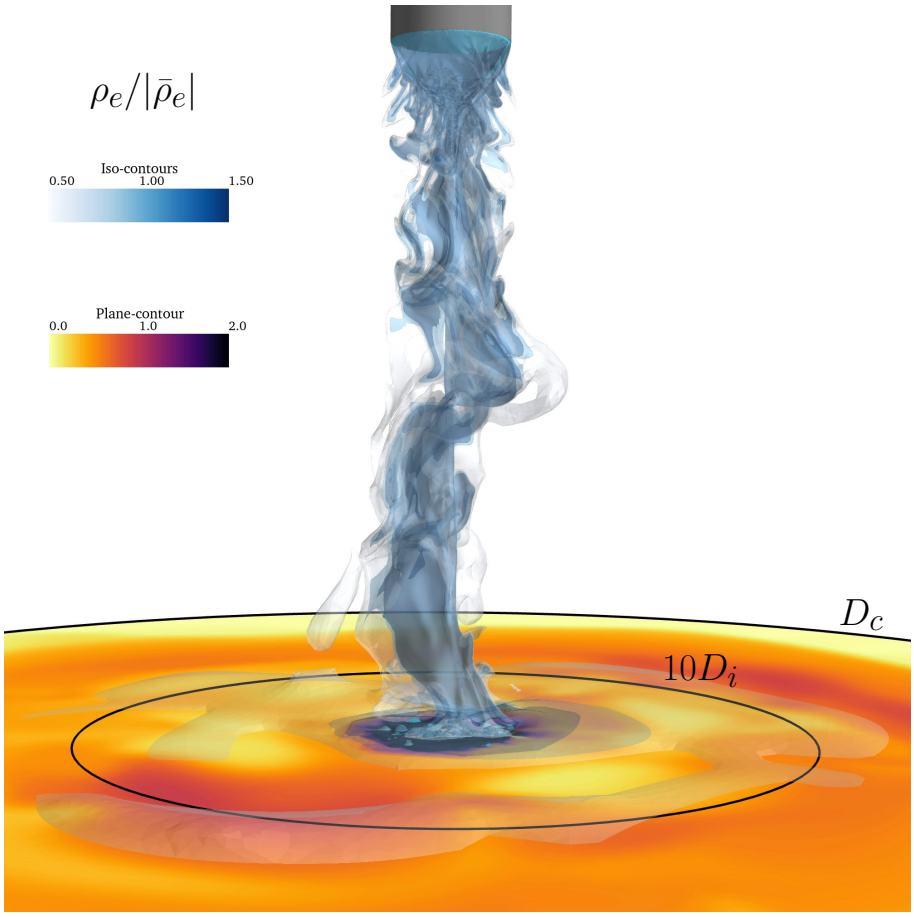


Figura 4.31: Estruturas ISO tridimensionais da densidade de carga elétrica $\rho_e/|\bar{\rho}_e| : \{0{,}5; 1{,}0; 1{,}5\}$, no tempo $t/\tau = 4{,}5$ e $Ca_E = 0{,}26$. A circunferência preta representa uma distância radial de $10D_i$. Resultado para $Ca_E = 0{,}26$

ção e conservação da carga elétrica no volume, as cargas tenham de viajar para fora da interface do líquido. Mesmo a densidade é apenas uma fração da carga acumulada na interface. Isso pode ser observado pelas estruturas tridimensionais formadas no domínio, como vemos na Figura 4.31. A figura mostra a isosuperfície que envolve o principal transporte de carga elétrica para um valor de $|\bar{\rho}_e| \pm 50\%$, onde $|\bar{\rho}_e|$ é o valor médio em todo o domínio. Também é possível ver a estrutura seguindo um comportamento ondulatório fora da interface líquida. Esta descoberta implica que o feito de chicote do jato e as suas instabilidades radiais estão ligados ao transporte de cargas elétricas no volume, e não apenas à polarização de cargas na interface. Este é um resultado importante, uma vez que os cálculos das cargas espaciais são importantes para a precisão da solução em eletrosprays [121].

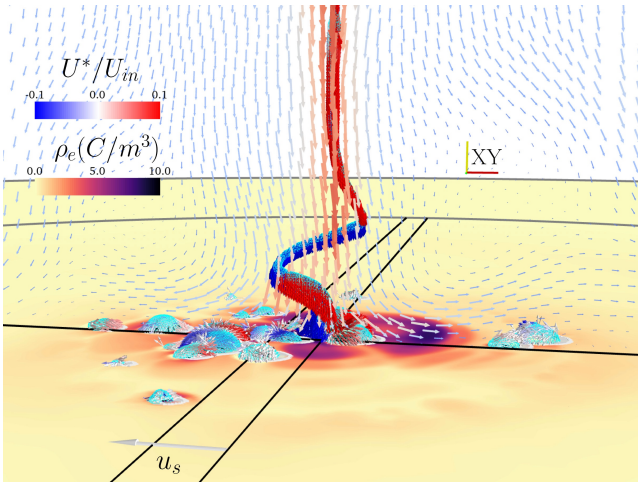
4.2.4.5 Deposição do jato

Fixando o potencial elétrico em $Ca_E = 0{,}26$ vamos agora analisar a dinâmica da deposição do líquido. A Figura 4.32 mostra os instantâneos da deposição de líquido para os passos de tempo característicos. O primeiro destes traços mostra o efeito de onda que ocorre no jato de líquido. Como vemos na Figura 4.32a, e devido à rápida ejeção do líquido, o jato

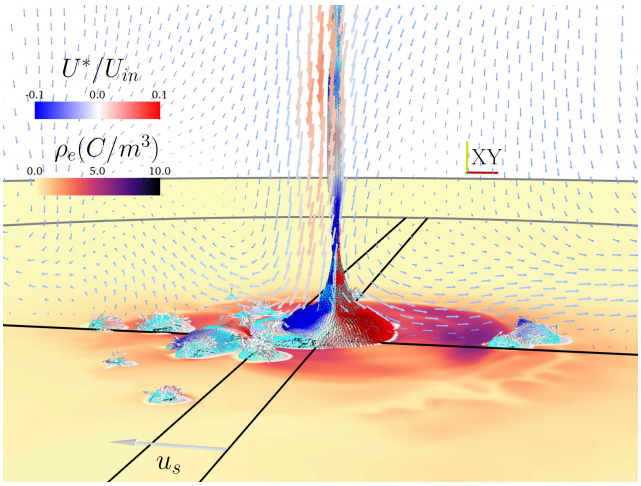
é espremido e ocorre uma deposição ondulatória. Como observámos anteriormente, esta onda teve origem num momento anterior no meio do voo do jato, ver $1.6\tau_h$ na Figura 4.30, que viajou uniformemente sobre o domínio até à deposição. Isto representa o primeiro contacto ininterrupto do cone de Taylor com o coletor, o que acontece no momento em que a região de pico de velocidade é atingida.
Uma deposição axissimétrica ocorre no tempo $2.1\tau_h$, e é mostrada na Figura 4.32b. Neste momento, o cone de Taylor está completamente ligado ao coletor e em constante ejeção. Observa-se uma grande velocidade à esquerda do jato, o que indica a formação de uma instabilidade de tipo chicote. Isto é confirmado no próximo instantâneo, na Figura 4.32c para o tempo $2.5\tau_h$.

4.2.4.6 Formação de instabilidades radiais

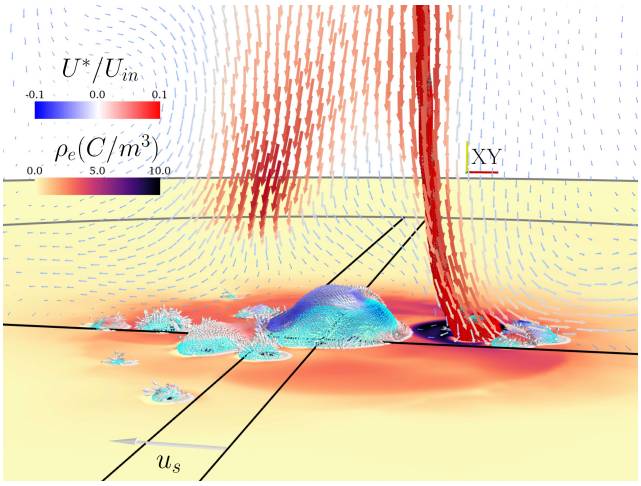
Consideramos agora o caso em que o cone de Taylor recuado está no seu mínimo, para a condição de trabalho de $Ca_E = 0{,}42$, e vamos estudar a dinâmica do chicote e o seu efeito no escoamento do fluido. Este caso foi escolhido porque, como a deposição do jato é constante, podemos determinar a dinâmica do comportamento da onda, e podemos caraterizar o comportamento do líquido com a evolução espaço-temporal da superfície do líquido. Uma melhor compreensão do comportamento deste tipo de jato pode permitir aumentar o controlo do jato, por todas as razões anteriormente referidas.
Em primeiro lugar a Figura 4.33 mostra a dinâmica espaço-temporal do jato colorida pela magnitude da velocidade. Como se observa, e embora o jato tenha uma quebra ao longo do domínio, a deposição do jato é contínua, e o cone de Taylor tem um tempo de recuo muito curto. Um resultado interessante é que o efeito de chicote no jato tem uma posição inicial muito estável, que é marcada na Figura 4.33 pela linha vermelha horizontal. Além disso, o transporte da onda tem também a mesma velocidade, dada na figura por $u_w = \Delta y/\Delta t$, com um tempo de voo de 5% de τ_h. É de notar que este tempo de voo é consideravelmente grande, mostrando que este comportamento de chicoteamento tem uma frequência elevada, e é difícil de captar experimentalmente.
Para compreender a dinâmica da instabilidade do tipo chicote do jato líquido vamos agora concentrar-nos num passo de tempo específico, mais precisamente em $0{,}64\tau_h$. Este momento representa o primeiro contacto completo do cone de Taylor com o coletor. A Figura 4.34 mostra este instante de tempo, onde a superfície do líquido é colorida pela densidade de corrente elétrica $\mathbf{D} = \rho_e \boldsymbol{u}$. Este é o campo vetorial que mostra a intensidade do transporte das cargas elétricas e está ligado à densidade da corrente elétrica. Como vemos a onda tem início no ponto de maior densidade de corrente elétrica. O interessante é que a ponta da onda fica alinhada com o eixo radial. Se a superfície do líquido não puder suportar mais acumulação de carga elétrica a carga será puxada em direção às linhas de campo elétrico, como vemos na Figura 4.34, de forma radial, desde o eixo y até à placa de terra para fora do líquido.
Além disso o campo elétrico será deformado devido à presença de cargas elétricas na superfície do líquido. Este efeito do jato no campo elétrico pode ser observado na Figura 4.35. Esta figura mostra as isolinhas para o potencial elétrico, que, como vemos, são de-



(a) $t/\tau_h = 1.9$



(b) $t/\tau_h = 2.1$



(c) $t/\tau_h = 2.5$

Figura 4.32: Instantes de três momentos diferentes: (a) O impacto inicial do jato; (b) a deposição simétrica do jato imediatamente antes do impacto da segunda onda em (c). O chão é colorido pela densidade de carga elétrica e o campo vetorial da velocidade na interface do líquido é mostrado como ($U^* = 1000U$). Uma linha branca mostra o deslocamento do piso no momento correspondente (o deslocamento é considerado zero no momento do primeiro contacto do líquido com o prato coletor, correspondente a $t_0\tau = 1{,}0$). Condições de $Ca_E = 0{,}26$ e $u_s = 20\text{mm}\,\text{s}^{-1}$.

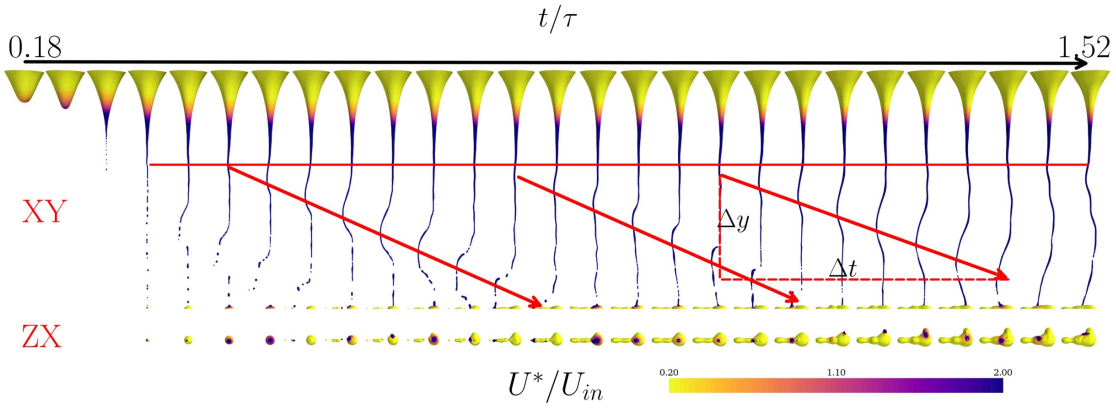


Figura 4.33: Evolução espaço-temporal da superfície livre do jato líquido para o Caso II. São apresentadas duas vistas perpendiculares, uma vista lateral (XY) e uma vista superior (ZX) na região da gota. A iso-superfície é colorida pelo módulo da velocidade ($u^* = 1000u$). A linha vermelha horizontal marca a região de início do chicote de ondas ($y/D_i = 3{,}44$) e as linhas vermelhas diagonais mostram a translação do nó do chicote de ondas. Neste caso a condição de trabalho é $Ca_E = 0{,}42$ e $We_E = 20{,}45$.

formadas pelo jato.

A consideração final a ser feita para o passo de tempo é o seu efeito no escoamento. A Figura 4.36 mostra o padrão instantâneo das linhas de corrente do campo de velocidade e as isolinhas da magnitude da vorticidade. A vorticidade é calculada a partir de $\omega = \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial u_y}{\partial y}$. A vorticidade do escoamento mostra-nos o puxar e o empurrar do jato nas diferentes regiões. Repare-se que valores positivos significam que o escoamento foi rodado no sentido dos ponteiros do relógio e valores negativos significam que foi rodado no sentido oposto. É interessante notar a vorticidade parasita na ponta do cone de Taylor, o que indica que há um crescimento da instabilidade e é produzida uma onda.

Como observámos nos resultados anteriores, para grandes números de Ca_E a dinâmica é muito complexa e apresenta um comportamento caótico. É importante analisar o comportamento médio da dinâmica. Uma vez que uma "média normal" no tempo iria esconder características importantes da dinâmica do líquido, criámos uma forma alternativa interessante de mostrar a média das instabilidades. Isto é feito sobrepondo as isosuperfícies da superfície livre do líquido e mudando a sua cor com o tempo. Este tipo de gráfico pode ser observado na Figura 4.37. A figura mostra a dinâmica temporal do líquido a partir de uma perspetiva temporal completa e para diferentes potenciais elétricos. Note-se que, com o aumento do potencial elétrico, as instabilidades do jato de líquido se tornam mais amplas, embora, a partir de um certo ponto, não haja poluição do escoamento por pequenas gotículas.

Devemos recordar que estas pequenas gotículas geradas na região de tempo recuado t_r são muito caóticas, divididas principalmente pelo efeito do campo de velocidade criado, e isto pode ser um problema, devido à criação de gotículas dispersas. Por exemplo, em aplicações de impressão a jato, pode ser útil conter estas estruturas para garantir uma boa precisão. Devemos observar que, ao aumentar o potencial elétrico para $Ca_E = 0{,}38$, eliminamos a geração deste tipo de gotículas, esmagando o tempo de recuo, e criando uma ejeção contínua de líquido. Com uma ejeção contínua de líquido a dispersão de pe-

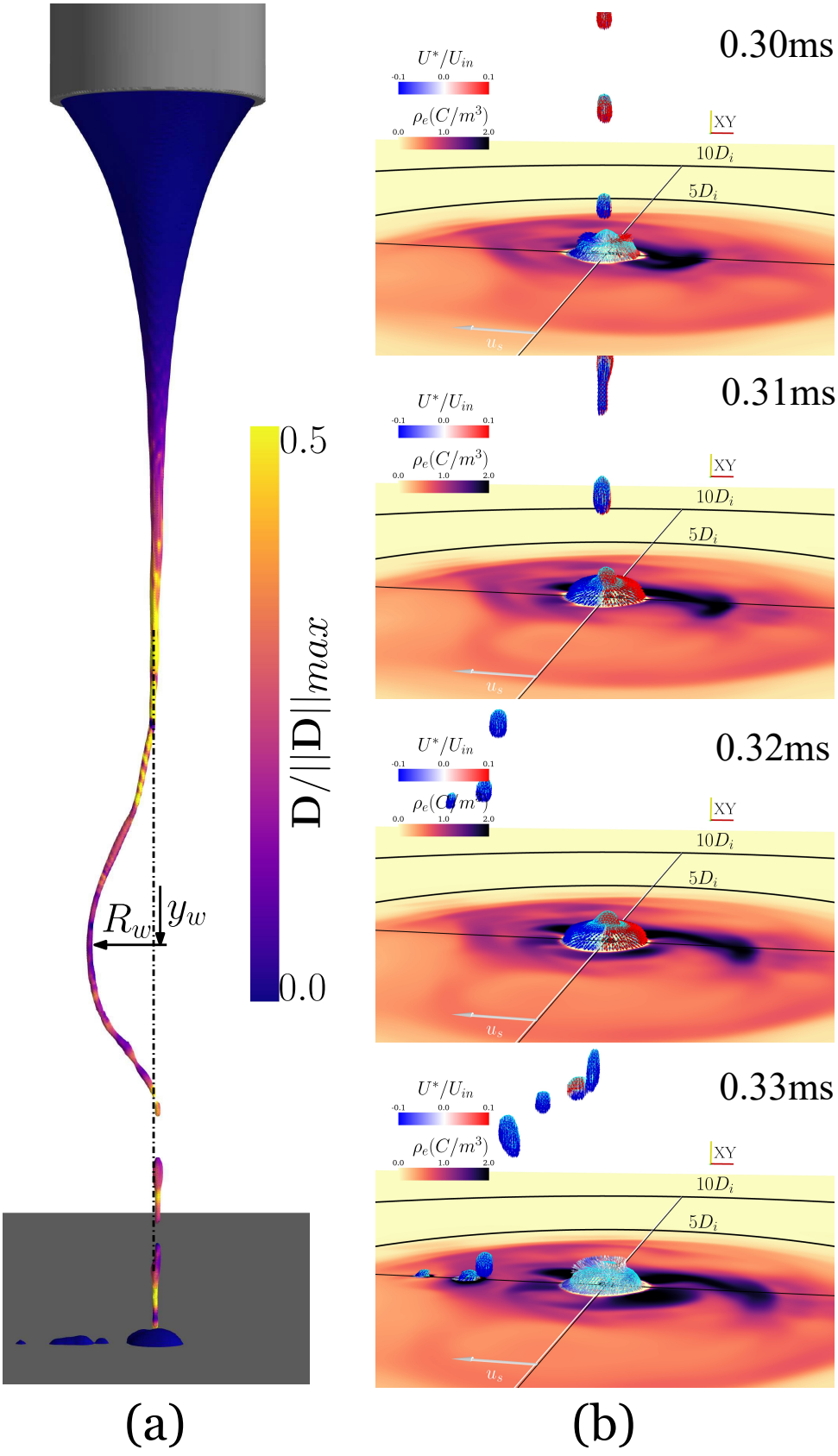


Figura 4.34: (a) Iso-superfície do jato líquido, apontando para o nó do chicote, colorida pela densidade de corrente elétrica normalizada $\mathbf{D} = \rho_e \boldsymbol{u}$.

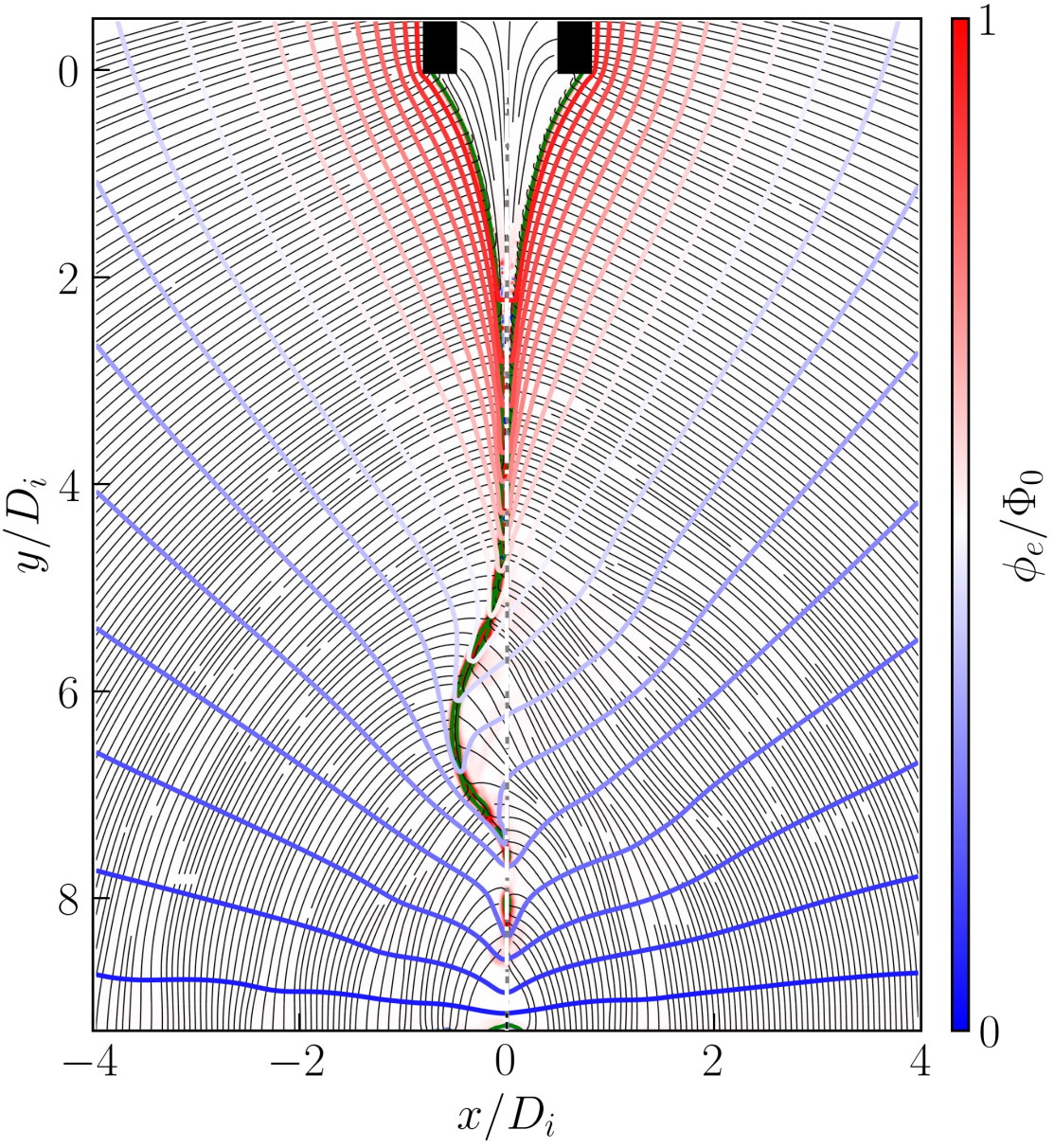


Figura 4.35: Corte bidimensional plano, mostrando o padrão instantâneo das linhas de corrente do campo elétrico $\boldsymbol{E}$ e as iso-linhas do potencial elétrico ϕ_e..

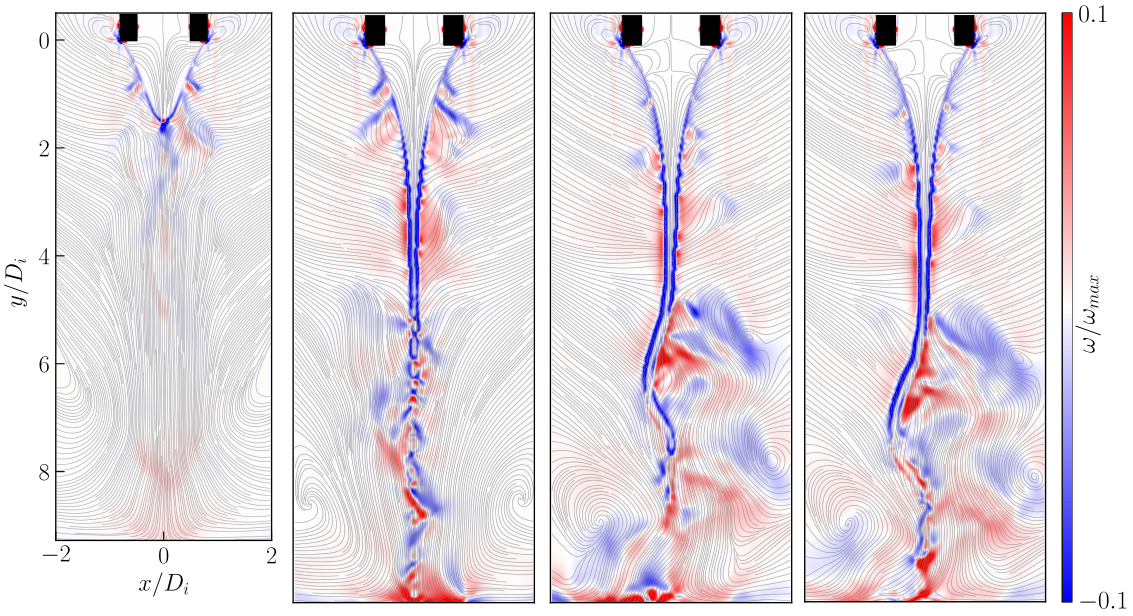


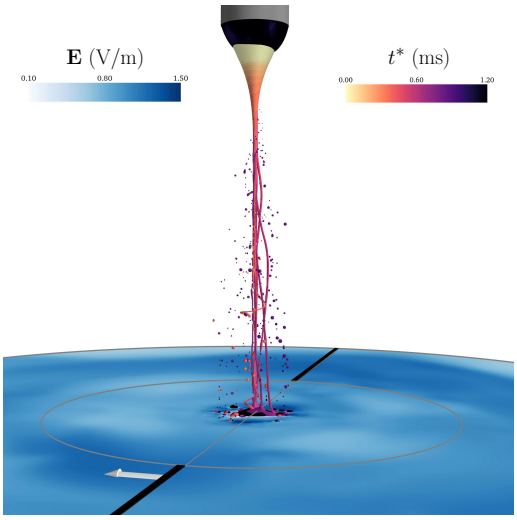
Figura 4.36: Padrão instantâneo das linhas de corrente do campo de velocidades e das iso-linhas da vorticidade $\omega = \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial u_y}{\partial y}$.

quenas gotículas (e a deposição não precisa) pode ser evitada. Se não quisermos demasiada deposição num só local podemos aumentar a velocidade do coletor. Embora, como foi mencionado anteriormente, esta seja uma janela de funcionamento muito estreita, se aumentarmos o potencial elétrico, criaremos explosões de gotículas no meio do jato de líquido ou mesmo uma operação multijato. Como nos lembramos, os últimos modos de operação mencionados não são tratados neste trabalho, propositadamente, porque determinámos que um modelo de turbulência deve ser aplicado nesse caso, porque a dispersão radial do jato líquido no domínio aumentará.

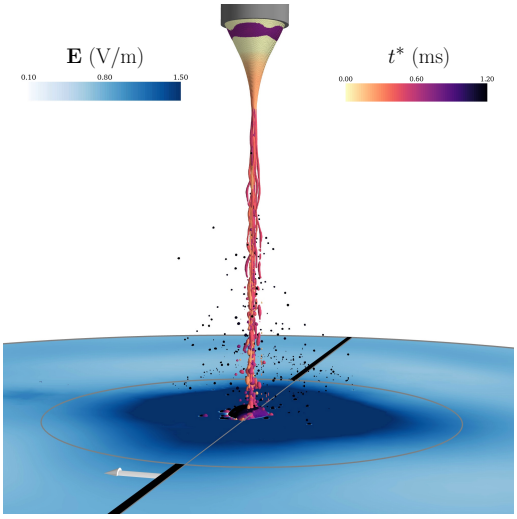
4.2.5 Resumo

Nesta secção apresentámos uma simulação tridimensional completa de um jato eletrohidrodinâmico utilizando o método do Volume de Fluido acoplado ao tensor de tensões de Maxwell e à conservação da carga elétrica. Este modelo EHD $3D$ de duas fases foi validado com dados experimentais, mostrando uma boa precisão no cálculo da formação temporal do cone de Taylor, e também na emissão do jato e no impacto do jato/gotícula na superfície, mostrando uma melhoria quando comparado com o modelo simétrico presente na literatura. Demonstrou se assim o poder e a capacidade, bem como a elevada exatidão, deste tipo de modelo.

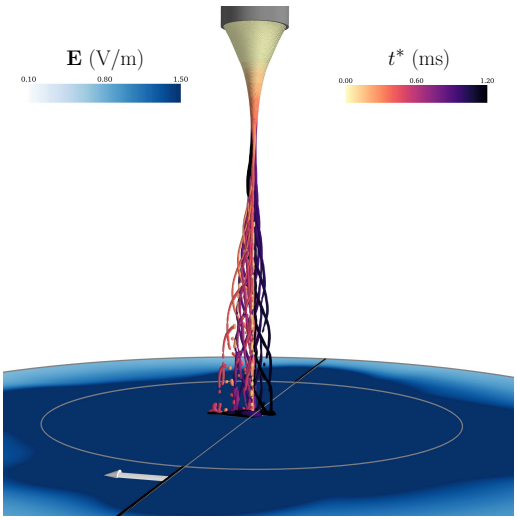
O modelo totalmente tridimensional permitiu a visualização da evolução espaço-temporal do jato líquido eletrohidrodinâmico, de que em resumo vemos a Figura 4.38. Quando injetado a partir de um bocal capilar, e permitiu testar a estabilidade do modelo para diferentes condições de potencial elétrico. A instabilidade do escoamento deve-se à fuga de cargas elétricas do jato de líquido. Esta pequena fração de cargas elétricas no volume cria um escoamento não simétrico que afeta o campo elétrico e, consequentemente, a força do



(a) $Ca_E = 0.26$



(b) $Ca_E = 0.32$



(c) $Ca_E = 0.42$

Figura 4.37: Visualização da dinâmica completa do jato líquido com números crescentes de Ca_E. Iso-superfícies coloridas pelo tempo t_c. O tempo total de sobreposição é de $1{,}5$ ms. A placa do coletor é colorida pela intensidade do campo elétrico $\boldsymbol{E}$.

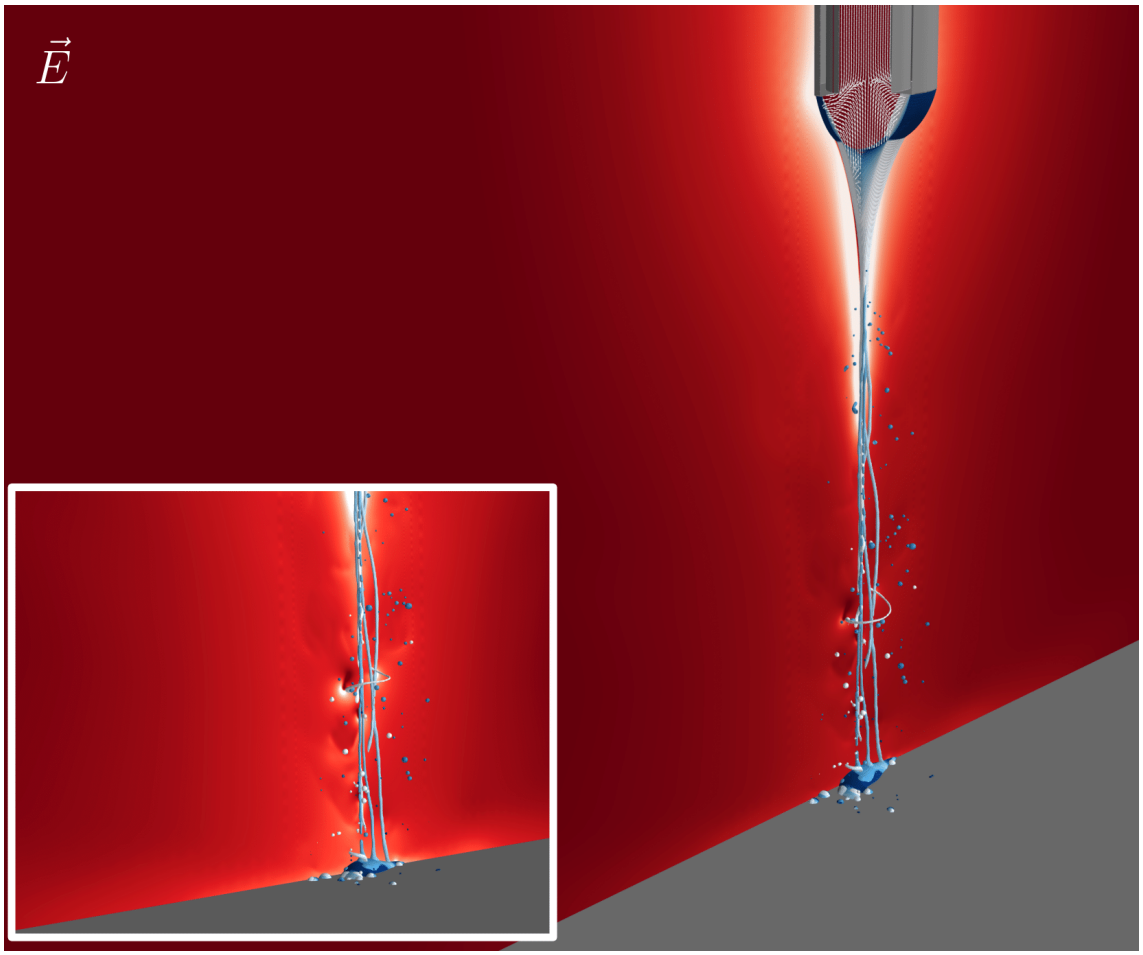


Figura 4.38: Resumo gráfico das instabilidades tridimensionais estudadas com visualização das instabilidades do efeito de chicote e o campo elétrico.

corpo elétrico na interface do líquido. Na região de quebra do jato ocorre uma competição pela estabilidade do jato líquido, devido a um aumento elevadíssimo da densidade de corrente elétrica, conduzindo a padrões de escoamento complexos, tais como a dispersão de gotículas carregadas devido ao campo de velocidade gerado, ou o chicoteamento do jato líquido devido à componente radial do campo elétrico.

Foram visualizadas as condições de funcionamento da emissão de gotículas sem a formação do cone principal de Taylor, incluindo gotículas secundárias e satélites que são geradas de forma caótica. Pensa-se que para o modelo numérico proposto, nomeadamente a capacidade de modelar as gotículas geradas pelo cone de Taylor em recuo podem ser úteis para aplicações de jato de impressão para aumentar a área de superfície e a ligar as gotículas principais. Para utilizar este efeito, o modo transiente entre a ejeção de uma única gota e o modo de tipo de chicote tem de ser cuidadosamente controlado.

O nosso modelo é automatizado com um *script*, no qual diferentes dimensões do bocal, diâmetros interior/exterior e o comprimento, o que permite que seja facilmente utilizado para estudos paramétricos. Uma investigação mais aprofundada sobre simulações de múltiplos jatos, incluindo efeitos de turbulência nas pequenas gotículas que observamos, é uma das principais razões pelas quais a nossa simulação não aumentou ainda mais o número Ca_E e este é um tópico futuro a explorar.

4.3 Atomização do jato e Formação de Plumas [4]

4.3.1 Modelação híbrida VOF-LPT

A maior parte da investigação em eletrosprays considera apenas a parte inicial do jato, com a formação do cone de Taylor e a quebra primária do jato (região Cone-Jet da figura 4.39), ou apenas a dinâmica das partículas da pluma de pulverização (região Primary Spray Plume da figura 4.39). No primeiro tipo de simulações os autores utilizam algoritmos baseados em Boundary Element Methods (BEM) [125] ou Volume-of-Fluid [48, 127]. No segundo tipo é comum usar uma abordagem lagrangiana de partículas e as leis de Newton para calcular a trajetórias das partículas [130, 46], considerando estas como pontos finitos.

Nesta secção da tese, apresentamos um modelo híbrido, a partir do acoplamento 3D do modelo hidrodinâmico anteriormente discutido, na Secção 3.2, e um modelo cálculo da trajetória Lagrangiana de partículas (Lagrangian Particle Tracking - LPT) [111], tal como detalhado na Secção 3.5.

A formação de jatos de eletrospray e *electrospinning* é bem conhecida pelas suas características de multiescala, em que estão em jogo diferentes escalas. A ordem da geometria é o milimétrica, e a ordem de grandeza do jato é normalmente 10 vezes menor, e o diâmetro das gotículas pode ser cerca de 100 vezes menor do que o diâmetro do bocal capilar. Por esta razão uma malha fixa padrão pode ser um desafio e requerer uma elevada potência computacional. Por estas razões a nossa investigação utiliza o refinamento dinâmico da malha para a interface do líquido. Veja-se o esquema da Figura 4.40 onde as duas regiões estão marcadas.

A simulação numérica das gotículas é muito complexa em métodos VoF, mesmo com a abordagem de refinamento adaptativo da malha de cálculo. Este facto deve-se à resolução de malha necessária para captar bem a interface. Para as gotículas mais pequenas não há deformação significativa, e onde a esfericidade da gota é aproximadamente 1. Isto significa que estas gotículas podem ser aproximadas a uma partícula esférica e podem assim ser resolvidas por um método Lagrangiano. A vantagem de um método Lagrangiano para o VoF é que a potência computacional é muito menor e o tempo de cálculo diminui significativamente. Referimo-nos a este modelo como EHD-VoF-LPT, uma vez que é a junção do modelo EHD com o método VoF e depois o acoplamento com o modelo LPT.

4.3.2 Definição do problema

O bocal capilar, também designado por emissor, tem um diâmetro interior de D_i, um comprimento de L e um diâmetro exterior de D_o, que define um limite de parede Γ_E. A parede do emissor está sujeita a um potencial elétrico externo fixo e igual a Φ_0. Uma placa circular (Γ_A) com um diâmetro exterior D_c, e que tem um orifício circular centrado com um diâmetro D_o é colocada a um potencial elétrico igual a Φ_1. Esta placa encontra-se a uma distância (da ponta do emissor) igual a H_1 e tem uma largura de W_e. Esta

[4] Resultados baseados em S. Cândido and J. C. Páscoa, "Numerical simulations of the atomization of electrified liquid jets with a 3D coupled VoF/LPT model", a ser submetido em Journal of Aerosol Science.

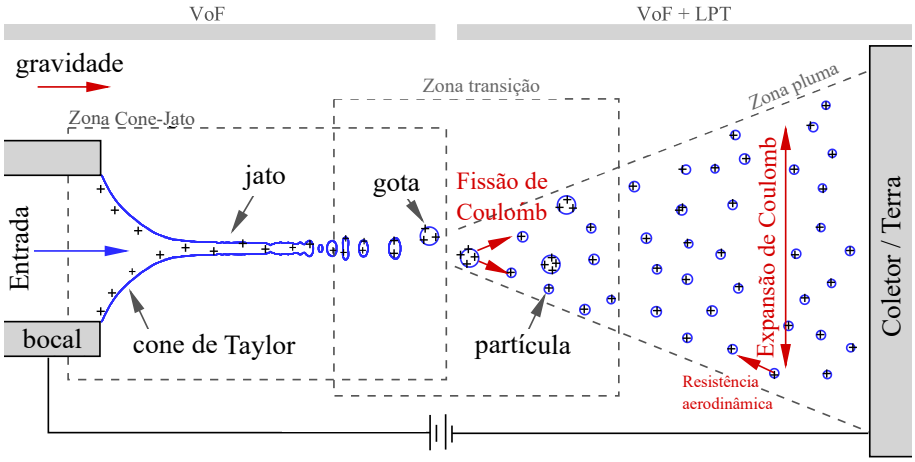


Figura 4.39: Esquema da deposição por eletrospray, com as diferentes regiões de interesse.

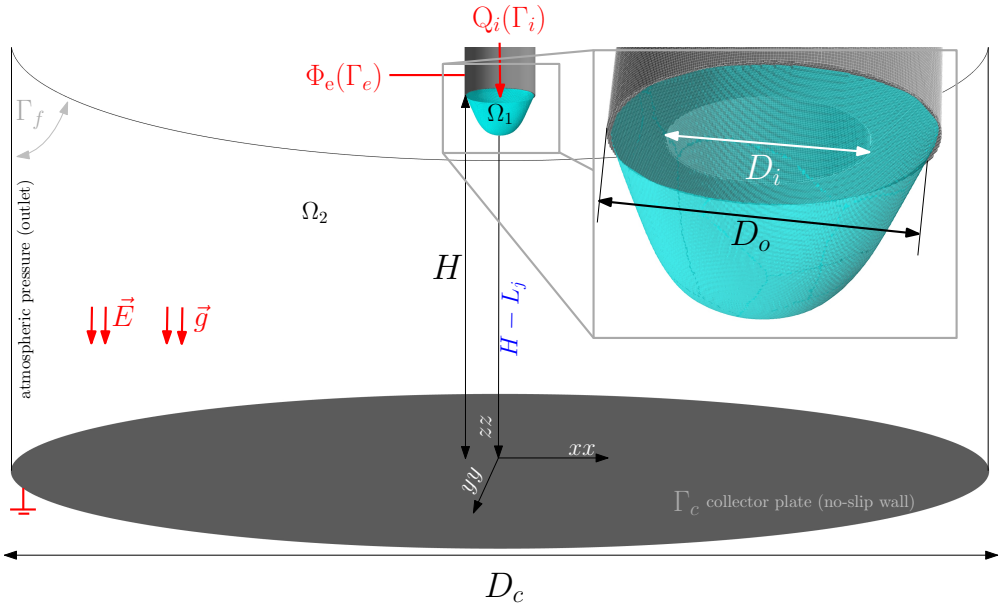


Figura 4.40: Esquema do domínio do caso de teste para a atomização do jato, com a menção às condições de fronteira Γ_i, Γ_e, Γ_c e Γ_f.

placa é designada por *coletor*. Estes parâmetros geométricos são fixados neste estudo e apresentados na Tabela 4.5.

Novamente, definem-se as condições de fronteira para cada fronteira Γ,

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = \Phi_0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_e, \quad (4.25)$$

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_c, \quad (4.26)$$

$$\boldsymbol{u} = \left(0; 0; \frac{4\pi}{D_i^2} Q_i\right), \quad \alpha = 1, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \phi_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_i, \quad (4.27)$$

$$p = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[\boldsymbol{u}, \alpha, \phi_e, \rho_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_f. \quad (4.28)$$

A diferença deste caso de teste para os anteriores advém das condições que têm de ser

Tabela 4.5: Propriedades e constantes do problema de teste, que incluem as propriedades hidrodinâmicas e elétricas [9] do sistema de duas fases e propriedades geométricas fixas. ε_0 é a permissividade do vácuo $8{,}85$ $\mathrm{pF\,m^{-1}}$, para o qual $\varepsilon_{r,i} = \varepsilon_i/\varepsilon_0$.

	Propriedades físicas do líquido (L - Ω_1) e do meio (M-Ω_2)	Valor	[unidade]
ρ_1	Densidade -L	685	$[\mathrm{kg\,m^{-3}}]$
ρ_2	Densidade - M	1.225	$[\mathrm{kg\,m^{-3}}]$
μ_1	Viscosidade - L	0.390	$[\mathrm{mPa\,s}]$
μ_2	Viscosidade - M	0.012	$[\mathrm{mPa\,s}]$
γ	Tensão superficial - L/M	18.1	$[\mathrm{mN\,m^{-1}}]$
σ_1	Condutividade elétrica - L	1.93	$[\mathrm{\mu S\,m^{-1}}]$
σ_2	Condutividade elétrica - M	0.1	$[\mathrm{pS\,m^{-1}}]$
$\varepsilon_{r,1}$	Permissividade relativa - L	1.9	[-]
$\varepsilon_{r,2}$	Permissividade relativa - M	1.0	[-]
	Propriedades geométricas constantes		
D_i	Diâmetro interno	0.12	$[\mathrm{mm}]$
D_o	Diâmetro externo	0.45	$[\mathrm{mm}]$
H	Distancia vertical bocal-coletor	30	$[\mathrm{mm}]$
D_c	Diâmetro do coletor	$60(2H >> 20D_i)$	$[\mathrm{mm}]$
L	Comprimento do bocal	$1.20(> 10D_i)$	$[\mathrm{mm}]$

impostas para a conversão das células do meio contínuo para o meio discreto. Para garantir que, no momento da conversão de uma gotícula de VoF para uma parcela de LPT, a partícula não se encontra em movimento vibracional/transição da carga elétrica, a conversão é feita em intervalos de 100, garantindo que a relaxação elétrica na gota líquida já aconteceu (que será 100 vezes o tempo de relaxação elétrica τ_e).

4.3.3 Validação

A validação do solver consiste na comparação entre a velocidade axial, o módulo do campo elétrico e o diâmetro das gotas em determinadas posições que foram medidas experimentalmente e ainda os resultados obtidos por outro modelo numérico. Como já foi discutido, este caso de teste é baseado na configuração experimental de [9], que foi então usada para comparação num modelo numérico baseado numa estrutura Euleriana-Lagrangiana feita por [10]. Nestes testes, os bocais capilares são definidos para um potencial elétrico fixo ($\tilde{\phi}_e$) igual a $5\ \mathrm{kV}$ e caudal de entrada (Q_i) igual a $2{,}778\ \mathrm{mm^3\,s^{-1}}$.

Nestas condições medimos primeiro a velocidade axial ao longo da linha central do domínio (eixo z), ver figura 4.41. A figura mostra a comparação entre os dados experimentais e as linhas de amostragem da abordagem numérica. A linha tracejada cinza na figura é o ponto de injeção das partículas dos estudos de [10], onde a distância axial é $z = 2{,}5$ mm. Observando os resultados do nosso modelo é possível ver onde o jato se quebra e se transforma em gotículas. Atribuímos a este ponto o comprimento do Cone-Jet (L_j).

O segundo campo a comparar entre is nossos resultados e os resultados experimentais é referente ao módulo do campo elétrico ao longo do eixo zz. Os resultados obtidos são mostrados na Figura 4.42. Estes mostram a variação do campo elétrico ao longo do eixo zz,

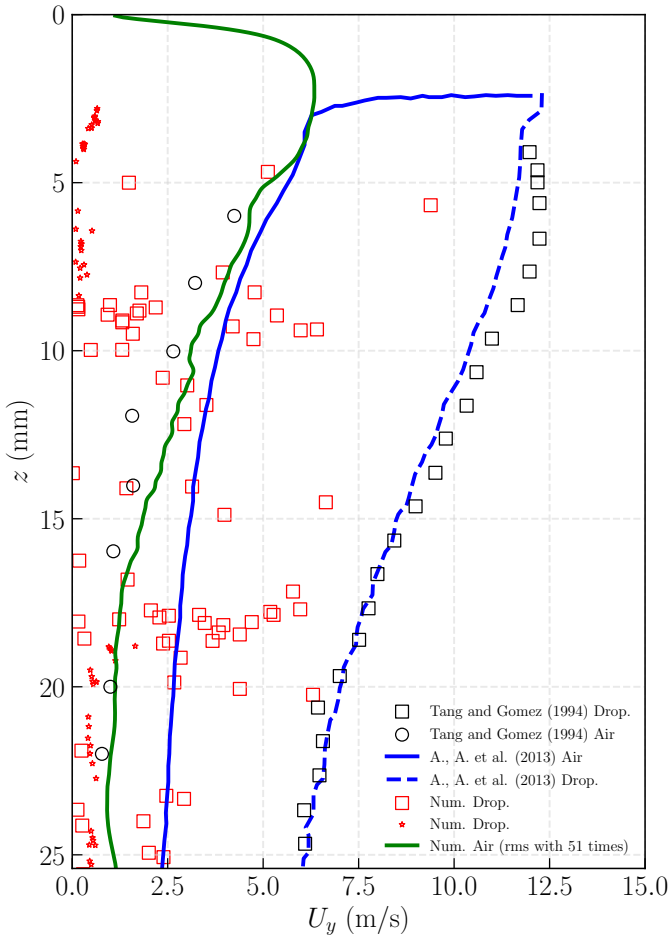


Figura 4.41: Comparação entre os resultados do presente modelo e os experimentais [9] e numéricos [10], para as variáveis velocidade do escoamento e das gotas.

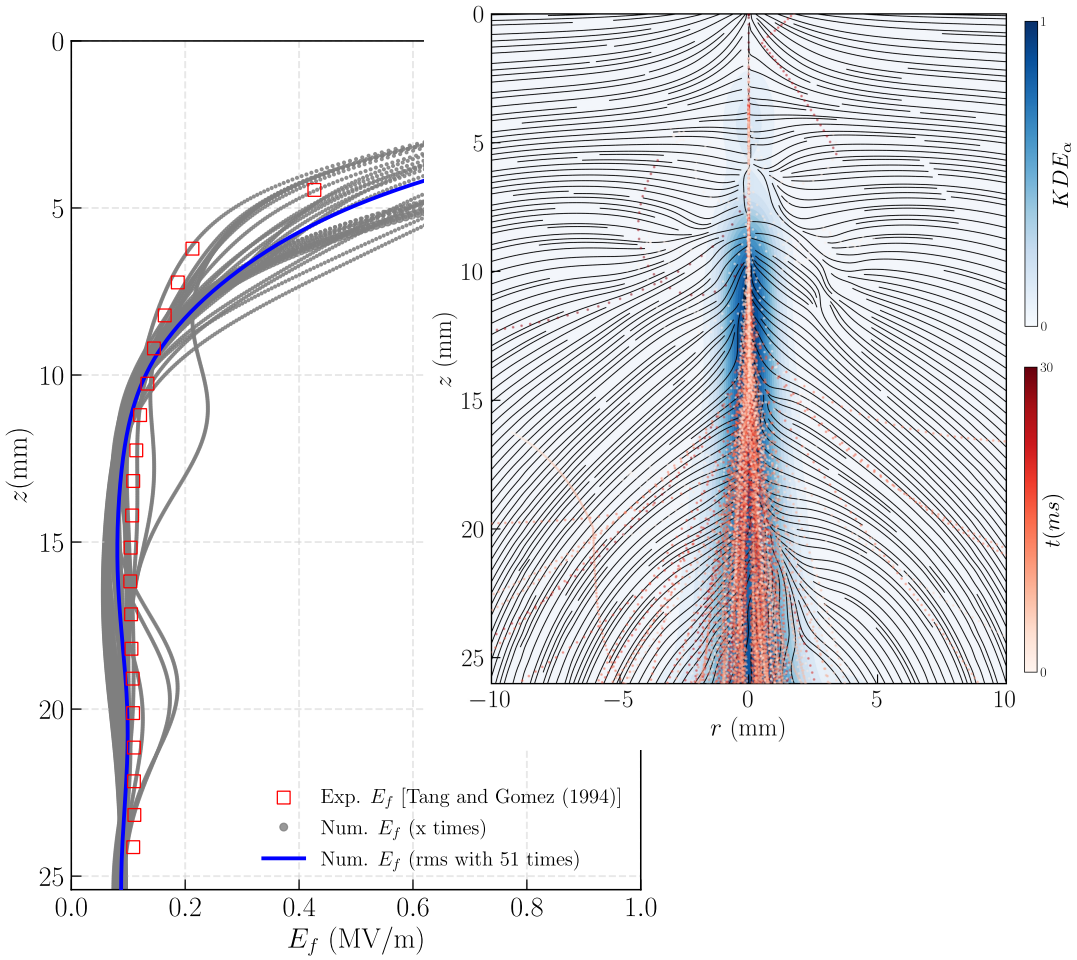


Figura 4.42: Comparação entre os resultados obtidos e os experimentais [9], neste caso para o módulo do campo elétrico.

para o qual temos a comparação com os resultados experimentais. A linha azul é a média das medições numéricas. Constatamos que temos uma boa precisão no campo elétrico. Do lado direito da figura, dispomos três informações diferentes. Primeiro, observamos as linhas de corrente tangenciais ao campo vetorial do campo elétrico (linhas a preto), depois verificamos a variação temporal da posição da iso-superfície da superfície livre do líquido (colorida pelo mapa vermelho em função do tempo) e, por fim, temos o campo da Estimativa de Densidade Kernel (KDE) para o campo de α.

A Estimativa de Densidade Kernel (KDE) é matematicamente expressa como:

$$\mathrm{KDE}(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{h}K\left(\frac{x - X_i}{h}\right). \quad (4.29)$$

Onde $\mathrm{KDE}(x)$ representa a função de densidade estimada no ponto x. Sendo n é o número de pontos de dados, K a função kernel (função de Gauss). X_i é o i-ésimo ponto de dados e h é o parâmetro de largura de banda, que controla a largura do kernel. Este afeta significativamente a suavidade da estimativa de densidade. Para um kernel Gaussiano, a

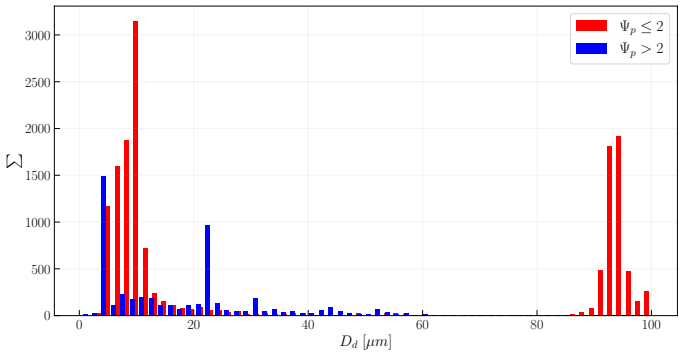


Figura 4.43: Histograma da distribuição do diâmetro das gotículas, colorido pela sua esfericidade.

função kernel K é especificamente:

$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\zeta^2}. \quad (4.30)$$

Aqui, ζ é uma variável padronizada $\frac{x - X_i}{h}$. A escolha da largura de banda h é crítica na KDE. No nosso caso, é utilizada a regra de Scott [146]. Esta estimativa é calculada para campo de VoF α, que denominamos por KDE_α. Este campo providencia a informação da concentração das gotas do escoamento.

4.3.4 Caracterização das gotas emitidas

Primeiramente analisamos a distribuição do tamanho das gotas geradas pelo eletrospray, mostrado na Figura 4.43. O histograma mostra uma distribuição bimodal dos tamanhos das gotas com picos nas categorias quase esféricas e deformadas, sugerindo a presença de duas populações distintas de gotas no spray. Surgindo a evidencia da existência de gotículas primárias e as secundárias pela formação de duas populações distintas. A maioria das gotas quase esféricas (vermelho) parece ter diâmetros em dois grupos principais de tamanho, enquanto as gotas deformadas (azul) têm uma distribuição mais uniforme numa determinada gama de tamanhos, indicando uma variação nos processos de deformação.
A distribuição bimodal observada para gotículas quase esféricas indica dois mecanismos predominantes de formação de gotículas. As gotículas mais pequenas podem ser o resultado de atomização primária perto do bocal ou de processos de quebra secundários, enquanto as maiores podem sugerir eventos de coalescência a jusante ou energia de quebra insuficiente. As gotículas deformadas hidrodinamicamente apresentam uma ampla distribuição de tamanhos, refletindo a complexa interação entre a tensão de corte do fluido, as forças aerodinâmicas e a tensão superficial que atua sobre as gotículas. Estas forças podem levar ao alongamento e formação de formas complexas e não esféricas.
Em segundo lugar, a velocidade das gotas é analisada na Figura 4.44. O histograma para a distribuição da velocidade apresenta um amplo espetro de velocidades para as gotículas quase esféricas, com uma elevada frequência de gotículas a velocidades mais baixas. Isto pode indicar uma desaceleração das gotículas após a atomização ou um resultado da

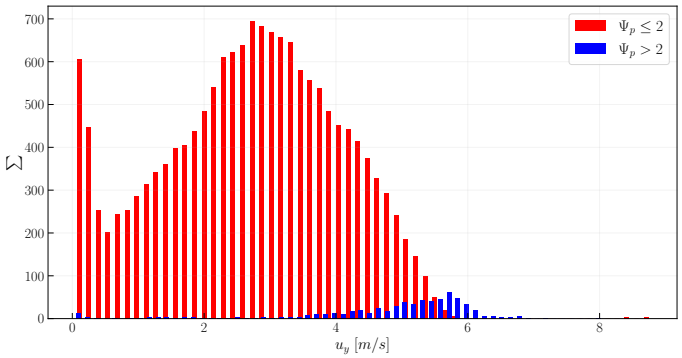


Figura 4.44: Histograma da distribuição da velocidade das gotículas, colorido pela sua esfericidade

dinâmica de coalescência e quebra das gotículas. As gotículas deformadas mostram uma gama mais estreita de velocidades, concentradas em valores mais baixos em comparação com as suas contrapartes esféricas, o que pode ser atribuído a efeitos de arrastamento aerodinâmico que são mais pronunciados em partículas não esféricas.
A ampla distribuição de velocidade das gotículas quase esféricas capta provavelmente os efeitos do vigor inicial da atomização e das interações subsequentes das gotículas, incluindo coalescência e fragmentação, que podem alterar a sua quantidade de movimento. A gama de velocidades mais estreita das gotículas deformadas sugere que estas gotículas estão sujeitas a uma maior resistência aerodinâmica, o que poderia amortecer as suas velocidades. A sua deformação implica um maior coeficiente de resistência aerodinâmica, reduzindo as suas velocidades terminais em comparação com as gotículas esféricas.

4.3.5 Campos VoF e LPT

Ao fazer o acoplamento VoF-LTP as gotas mais pequenas que $D_d < 15\ \mu\mathrm{m}$ são tratadas como pontos singulares e o jato e as gotas maiores pelo modelo da hipótese de meio contínuo. Na Figura 4.45 vemos esta distinção para a formação inicial do eletrospray.
A imagem mostra a evolução da pulverização ao longo do tempo, tal como simulada pelo modelo computacional híbrido que incorpora as técnicas Volume of Fluid (VoF) e Lagrangian Particle Tracking (LPT). O lado esquerdo de cada período de tempo mostra vetores que representam as gotículas que foram convertidas do domínio VoF para o domínio LPT. Estes vetores indicam a direção e o módulo da velocidade das gotículas. Os vetores mostrados são a velocidade de cada partícula no domínio LPT, mostrando como as gotas se espalham no domínio de forma radial, seguindo o campo elétrico. O lado direito corresponde às iso-superfícies derivadas do modelo VoF para o jato líquido. A placa coletora na parte inferior da imagem mostra a intensidade do campo elétrico que é concentrado no centro do prato.

4.3.6 Deposição da fase líquida

A Figura 4.46 fornece uma perspetiva tridimensional do padrão de deposição, dando uma visão mais abrangente da distribuição espacial e da extensão do espalhamento da gota na superfície. A série de imagens identificadas de 17,5 ms a 18,0 ms mostra a progressão

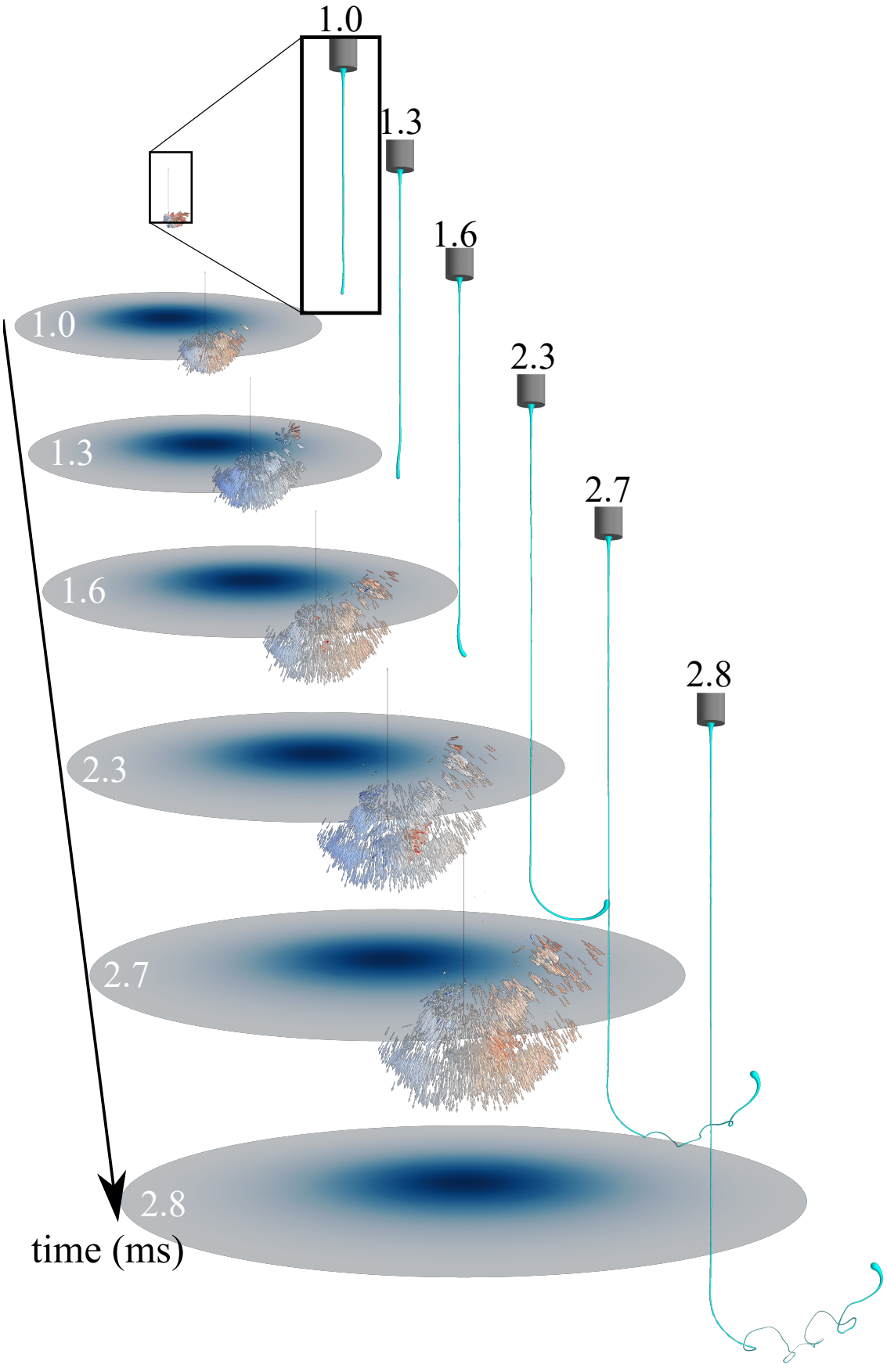


Figura 4.45: Evolução inicial do eletrospray, sendo que, do lado esquerdo, temos os vetores da velocidade de cada gota convertida para o domínio LPT e o coletor colorido pela intensidade do campo elétrico. Para cada tempo mostra-se, do lado direito, o zoom ao jato líquido.

temporal do impacto e espalhamento das gotículas numa superfície. A escala de cores, representada pela densidade de carga ρ_e nas gotículas, onde o vermelho está associado à densidade de carga mais elevada e o azul à mais baixa. Esta sequência demonstra o comportamento transiente das gotículas à medida que se depositam e interagem com a superfície e, possivelmente, umas com as outras. À medida que o tempo avança, as gotículas parecem espalhar-se e possivelmente fundir-se, alterando a distribuição local da densidade de carga na superfície.
Por outro lado, as gotículas maiores ou com gradientes de densidade de carga elevados devem ser retidas no domínio VoF durante mais tempo, para captar as complexas interações com o campo elétrico e as outras gotículas.

4.3.7 Resumo

Aqui demonstrou-se que o nosso modelo tridimensional híbrido VoF-LPT é totalmente capaz de apresentar resultados satisfatórios na formação de eletrospray. Ao analisar os resultados, podemos afirmar que:

1. A partir da distribuição do diâmetro, é clara a presença de gotículas pequenas, quase esféricas, o que valida o critério de transição de VoF para LPT. Estas gotículas podem ser transferidas de forma eficiente para o domínio LPT sem perda significativa de fidelidade, reduzindo a sobrecarga computacional e mantendo a precisão na captura das características da pulverização.

2. A distribuição de velocidade fornece informações sobre o comportamento cinemático das gotículas após a transição. As gotículas quase esféricas, uma vez convertidas em LPT, devem manter um perfil de velocidade que reflita a influência da dinâmica de rutura e coalescência, como indicado pela sua distribuição de velocidade mais ampla.

3. Para as gotas deformadas, o modelo VoF continua a resolver a sua dinâmica até atingirem um estado em que se justifique a conversão para LPT (de acordo com os critérios descritos do modelo 3.5), o que pode inclui um relaxamento da forma, da esfericidade e carga elétrica.

4. A análise da correlação entre o tamanho das gotículas e a velocidade após a conversão pode ajudar a refinar os critérios de transição entre VoF e LPT, garantindo que o modelo híbrido capte a física essencial da evolução das gotículas com eficiência computacional.

Esta análise contribui para a compreensão da interação complexa entre a dinâmica dos fluidos e a morfologia das gotículas nos sistemas de eletrospray, o que é crucial para otimizar as características da pulverização para várias aplicações, como a combustão, a deposição de materiais e a espetrometria de massa.
Os resultados sublinham a eficácia do modelo híbrido na distinção entre os dois regimes de gotículas e justificam a sua aplicação em simulações em que os recursos computacionais devem ser equilibrados em relação à necessidade de uma caraterização detalhada

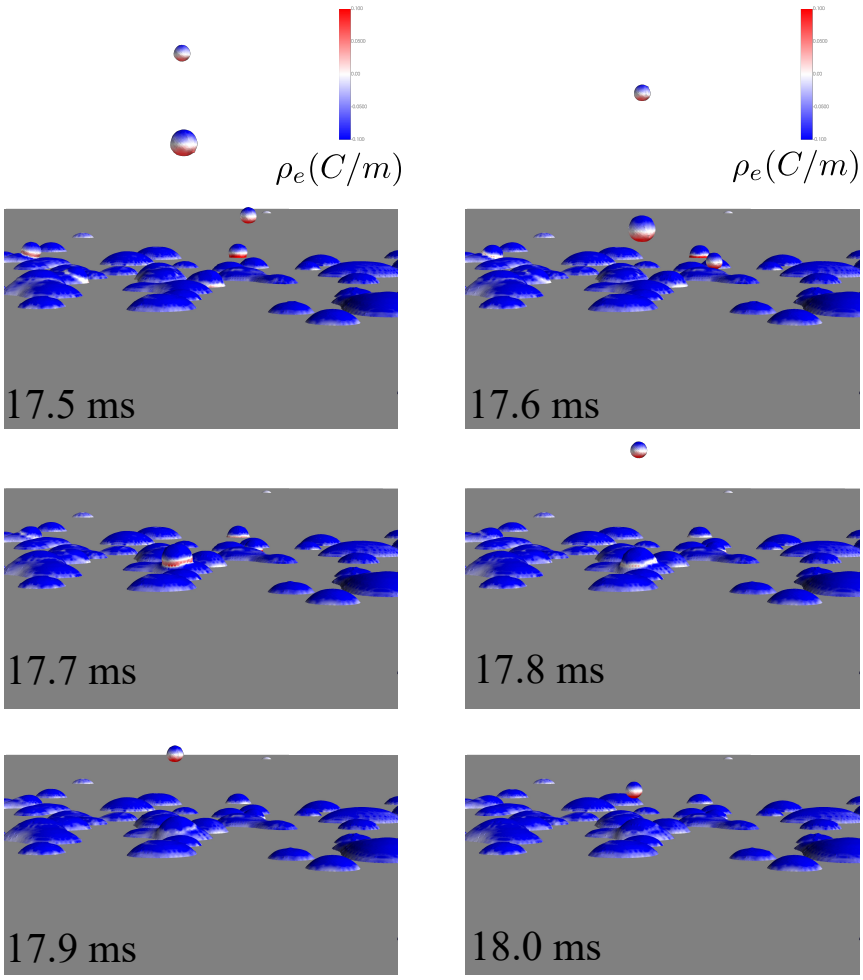


Figura 4.46: Deposição das gotículas formadas pelo eletrospray, onde em (a) visualiza-se a evolução temporal e a dinâmica das cargas elétricas e em (b) se dá uma visão geral da deposição, com as linhas brancas a mostrar o refinamento da malha computacional.

da pulverização. Esta abordagem permite um esforço computacional concentrado onde é mais necessário - resolvendo a dinâmica de fluidos complexa perto do bocal com VoF e rastreando eficientemente as numerosas gotículas pequenas no campo distante com LPT.

Capítulo 5

Exemplos de Aplicações de Jatos Eletrohidrodinâmicos

Este capítulo apresenta as seguintes temáticas.

- A utilização de decomposição modal através de POD e DMD e a sua aplicação a jatos EHD axissimétricos.
- Um estudo sobre de modelos de ordem reduzida em EHD.
- Um estudo da aplicação de jatos EHD em Micro-Propulsão Coloidal.
- A definição de modelos de Machine Learning e a sua aplicação em EHD computacional.

5.1 Modelos de Ordem Reduzida baseados em Decomposição Modal[1]

A transformada de Fourier (FFT) é uma metodologia clássica para analisar escoamentos transientes, e tem sido utilizada em diversos problemas de engenharia, sendo uma ferramenta que permite uma compreensão fundamental da dinâmica do escoamento. No entanto, a FFT funciona em cenários idealizados e pode contribuir um desafio quando se trata de uma análise baseada em dados estocásticos. Nos últimos anos, em particular devido à necessidade de desenvolver modelos substitutos no contexto dos gémeos digitais, os métodos de decomposição modal têm sido explorados como uma técnica para reduzir a ordem do sistema e extrair, de um conjunto de instantes de alta resolução, a base para minimizar o erro entre os instantes originais e a sua projeção ortogonal [147]. O método *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) pode extrair "modos" de uma base de dados de instantes do escoamento, decompondo sequências de dados transientes num conjunto de funções ortogonais. Este método de decomposição demonstrou ser uma boa ferramenta para determinar as características fundamentais de flutuação do escoamento [148, 149] e, em particular, foi aplicado para analisar jatos de líquidos turbulentos [150, 151].
Aqui propomos a aplicação destes métodos de decomposição ao campo escalar da carga elétrica de jatos EHD, extraindo as flutuações da estrutura do escoamento do campo de escoamento global. Esta ferramenta de extração permite uma análise dinâmica das estruturas coerentes do escoamento do jato líquido. Os resultados mostram que a alta frequência

[1] Resultados baseados nos publicados em **S. Cândido** and J. C. Páscoa, "On modal decomposition as surrogate for charge-conservative EHD modelling of Taylor cone jets", International Journal of Engineering Science, vol. 193, 12 2023. [124]

do transporte de carga elétrica ao longo do campo pode ser bem identificada e correlacionada com a coerência de fase em modelos de ordem reduzida, com base na reconstrução POD. Contudo, a frequência de amostragem dos instantes da solução numérica e o número de amostras são muito importantes para captar adequadamente a *energia* do campo. Com a decomposição baseada em POD pode extrair-se informação espaço-temporal relevante sobre a física, que pode ser utilizada para identificar as principais instabilidades e mecanismos no escoamento [152, 153].

O método POD tem uma restrição de frequência, uma vez que não se preocupa com a evolução temporal dos campos de escoamento, pelo que qualquer disposição dos mesmos instantes dá a mesma solução modal. Um método de decomposição que tem em consideração a ordem no tempo dos dados recolhidos é o *Dynamic Mode Decomposition* (DMD), que aproxima a evolução do sistema dinâmico complexo a uma combinação de características que evoluem linearmente no tempo [154, 155]. Também utilizaremos este método para aproximar o modelo de ordem completa da eletrohidrodinâmica a alguns valores próprios.

Propõe-se aqui a aplicação de métodos de decomposição modal como o *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) e o *Dynamic Mode Decomposition* (DMD) aos campo de escoamento de jatos EHD. As estruturas dinâmicas formadas pelo campo de velocidade e a dinâmica da carga elétrica determinam a dinâmica fundamental da emissão de gotículas. É efetuada uma análise da sensibilidade dos modos à frequência de amostragem. A influência de diferentes velocidades de entrada na decomposição é analisada no domínio espacial e da frequência. Um modelo de ordem reduzida (ROM) é interpolado a partir do POD de base, e demonstramos que pode ser utilizado para construir com êxito a velocidade e a carga elétrica ao longo do campo. Prevemos numerosas aplicações para este novo tipo de ROM, tais como a aceleração de cálculos eletrohidrodinâmicos, bem como o seu uso em modelos substitutos em gémeos digitais. Esta abordagem aqui estudada utiliza como caso de estudo os resultados numéricos para o Jato axissimétrico apresentado anteriormente no Capítulo 4, na secção 4.1 Jatos axissimétrico.

5.1.1 Introdução à Análise de Componentes Principais (PCA)

A Análise de Componentes Principais (PCA) é uma técnica estatística e matemática amplamente utilizada para a redução de dimensionalidade dum conjuntos de dados. A ideia subjacente à PCA é transformar um conjunto de variáveis possivelmente correlacionadas num novo conjunto de variáveis não correlacionadas, chamadas de componentes principais. Estas componentes são ordenados de modo a que o primeiro componente principal capture a maior variância possível nos dados, o segundo componente capture a segunda maior variância, e assim por diante.

Matematicamente, a PCA procura encontrar um conjunto ortogonal[2] de vetores, chamados de autovetores, que, quando usados para transformar os dados originais, maximizam

[2] Um conjunto de vetores é dito ortogonal se, para cada par de vetores distintos $\mathbf{v}_i$ e $\mathbf{v}_j$ dentro do conjunto, o produto interno entre eles for zero: $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j = 0, \quad \forall i \neq j$. A ortogonalidade é uma propriedade que garante que cada nova "dimensão"/"modo" extraído adicione o máximo de informações novas.

a variância dos dados ao longo desses vetores. Estes vetores são as direções principais existentes nos dados, e os seus comprimentos correspondentes são os denominados autovalores, que representam a quantidade de variância capturada por cada componente. Considere-se um conjunto de dados $\mathbf{X}$ de dimensão $m \times n$ (onde m é o número de observações e n é o número de variáveis), o objetivo da PCA é transformar $\mathbf{X}$ num novo conjunto de variáveis (componentes principais) que são uma combinação linear das originais. Considerando que $\bar{\mathbf{X}}$ é a média de $\mathbf{X}$, a PCA calcula a matriz de covariância $\mathbf{C}$, dada por,

$$\mathbf{C} = \frac{1}{m-1}\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}. \quad (5.1)$$

Tal que $\mathbf{v}_i$ e λ_i são, respetivamente, o i-ésimo autovetor e autovalor de $\mathbf{C}$, então,

$$\mathbf{C}\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i. \quad (5.2)$$

Os componentes principais (PCs) são então obtidos projetando os dados centralizados nos autovetores de $\mathbf{C}$, ou seja,

$$\mathbf{Y} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{V}, \quad (5.3)$$

onde $\mathbf{V}$ é a matriz cujas colunas são os autovetores de $\mathbf{C}$. Estes componentes principais são então ordenados da maior à menor variância na matriz dos dados.

5.1.2 Proper Orthogonal Decomposition (POD)

O nosso objecto de estudo aqui é a decomposição modal através do método de *snapshot*, para captura da dinâmica do escoamento. O termo *snapshot* é utilizado na análise modal quando nos referimos aos dados do campo de escoamento recolhidos num instante no tempo, que designamos por $\boldsymbol{S}_i$. O primeiro passo é criar uma matriz de instantes, $\boldsymbol{S} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, de um campo específico dos dados, em que m é o número de pontos no espaço e n o número de pontos no tempo. Esta matriz é uma pilha que inclui os diferentes instantes $\boldsymbol{S}_i$ tirados num passo de tempo fixo, ver Figura 5.1. O cálculo do POD aqui proposto é baseado em [156] e modificado para a nossa aplicação particular a EHD.
A decomposição ortogonal é uma técnica de decomposição modal que extrai um número de modos $\phi_i(i = 1, 2,...,m)$ com base na otimização das variâncias de campo que estão a ser examinadas [157]. Esta otimização corresponde a encontrar a base ortonormal que minimiza a variância entre os elementos da aproximação e a solução exata. É uma técnica muito difundida pois tem a capacidade de fornecer uma base ortogonal e possui uma hierarquia energética. Sob a restrição da ortonormalidade, a base POD é definida como aquela que maximiza a semelhança (medida pelo quadrado do produto escalar) entre a matriz de instantes e os seus elementos [155].

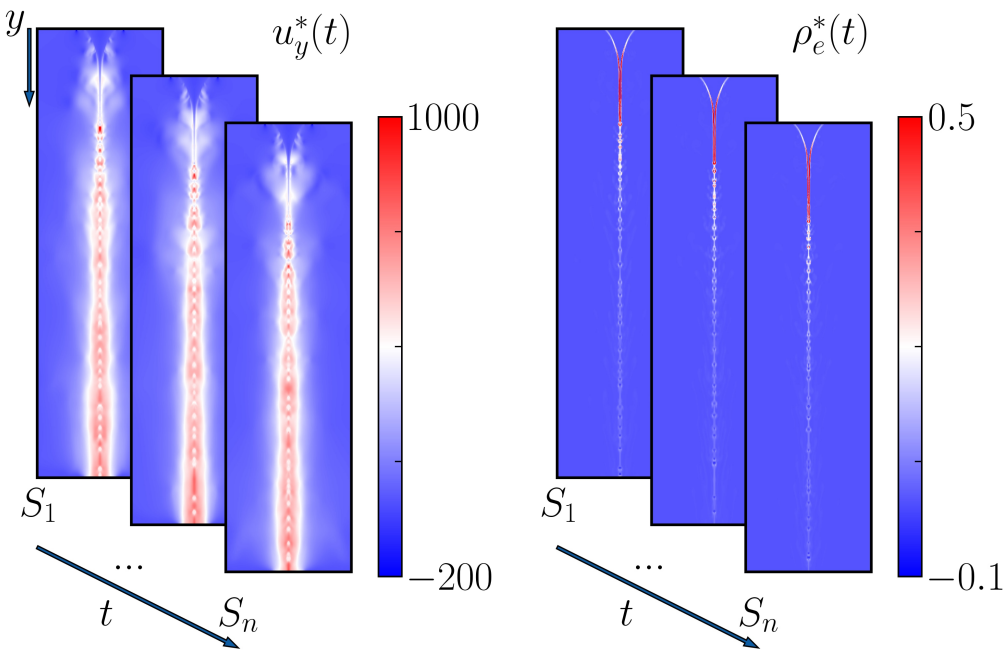


Figura 5.1: Ilustração dos instantes temporais da velocidade axial e da densidade de carga elétrica, para formar a matriz de dados **S**.

Seja $\boldsymbol{S}_i$ o instante capturado pelo modelo de alta dimensão, neste caso pela solução numérica, que designamos por Modelo de Ordem Completa (Full Order Model - FOM), onde $i = [1, \ldots, n]$ e n é o número de instantes. Consideremos o conjunto de instantes de um campo específico numa matriz **S** como,

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \boldsymbol{S}_1 & \boldsymbol{S}_2 & \cdots & \boldsymbol{S}_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}. \quad (5.4)$$

Que é definido para os instantes da velocidade como $\mathbf{S}^{\boldsymbol{u}} = \text{span}\{\boldsymbol{u}_h^1, \ldots, \boldsymbol{u}_h^n\}$ e para a densidade de carga elétrica $\mathbf{S}^{\rho_e} = \text{span}\{\{\rho_e\}_h^1, \ldots, \{\rho_e\}_h^n\}$. A esta matriz aplica-se diretamente uma Decomposição em Valores Singulares (SVD). A SVD é um dos possíveis algoritmos que pode ser utilizado para calcular os modos POD. Este método calcula a base POD decompondo a matriz *snapshot* como,

$$\mathbf{S} = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^*, \quad (5.5)$$

em que as colunas $\mathbf{\Phi} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ são vetores singulares à esquerda, $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz diagonal que contém os valores singulares λ_i, e $\mathbf{V}^* \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tem colunas de vetores singulares à direita. As colunas da matriz $\mathbf{\Phi}$ são os chamados modos POD, compostos por $[\varphi_1, \ldots, \varphi_n]$. Cada modo ϕ_i está relacionado como uma combinação linear de um valor próprio λ_i e um vetor próprio v_i, o detalhe do algoritmo SVD pode ser encontrado em

[158]. O POD não depende da disposição dos dados no tempo, o que significa que uma reorganização aleatória dos instantes dará os mesmos vetores próprios que identificam as medições espaciais. No entanto, os coeficientes de correlação entre os modos podem ser relacionados com as frequências correspondentes se os instantes forem ordenados no tempo e com o mesmo passo de tempo.
Note-se que se o campo de velocidades for analisado com POD, os modos $\varphi_i(y)$ captam de forma adequada a energia cinética do campo de escoamento instável e os valores próprios λ_i representam a quantidade de energia cinética detida por cada modo. Esta interpretação física pode ser feita apenas para o campo de velocidade, sendo que para um campo arbitrário é complicado afirmar um significado físico de um modo ou valor próprio, em vez disso, pode assumir-se que uma zona de correlação entre os modos representa uma estrutura coerente do escoamento. O POD encontra a base mais adequada em termos de energia para representar o campo do escoamento. Estes modos são ortogonais entre si, assegurando a otimização da extração de energia por cada modo [150]. Na nossa abordagem utilizamos o valor absoluto dos campos, significando que o escoamento médio será dado pela primeira base.

5.1.2.1 Comparação entre PCA e POD

A Análise de Componentes Principais (PCA) e a Decomposição Ortogonal Própria (POD) são dois métodos de redução de dimensionalidade amplamente utilizados em diferentes campos. Eles têm uma relação estreita com a decomposição em valores singulares (SVD). Para certos conjuntos de dados, PCA e POD podem fornecer resultados semelhantes ou até idênticos. A diferença fundamental está na matriz que está a ser decomposta: o PCA usa a matriz de covariância, enquanto POD usa a matriz de autocorrelação. Em muitos contextos as abordagens PCA e POD são equivalentes, principalmente quando os dados são centrados. Isso ocorre porque as matrizes de covariância e autocorrelação estão relacionadas por uma matriz de multiplicação transposta, logo os seus autovetores são os mesmos e a única diferença é o módulo dos autovalores. Em suma,

- A **PCA** está intimamente relacionada com a decomposição em valores singulares da matriz de dados centrada, $\bar{X}$. Matematicamente, a PCA envolve a decomposição:

  $$\bar{X} = U\Sigma V^T$$

  onde U, Σ, e V^T são as matrizes resultantes da SVD.

- O **POD** está relacionado com a decomposição em valores singulares da diferença entre a matriz de dados centrada, $\bar{X}$, e a expectativa dessa matriz, $E(X)$. Matematicamente, a POD envolve a decomposição:

  $$\bar{X} - E(X) = U\Sigma V^T$$

Ambos os métodos, PCA e POD, procuram captar as estruturas dominantes nos dados, mas são aplicados em diferentes contextos e interpretados de maneira diferente.

5.1.3 Resultados para o Jato EHD Axissimétrico

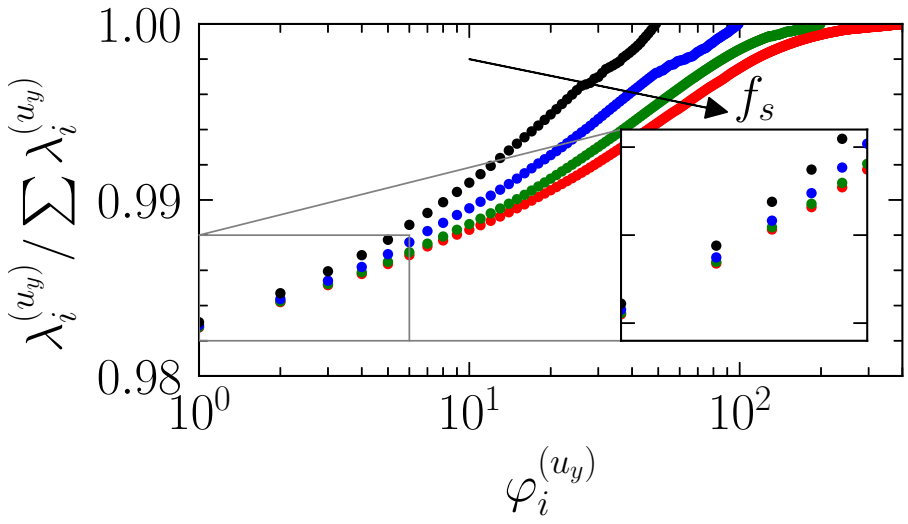
Considerando um tempo total de amostragem, Δt_s, superior a duas vezes o tempo de flutuação do caso com $83Q_0$ (flutuação do jato, ver resultados FFT do Capítulo 4.1). Isto significa que as nossas amostras são para um período de tempo igual a $\Delta t_s = 1/f_0$, onde f_0 é a menor frequência dominante do jato, embora tenhamos utilizado um fator de segurança de $1{,}25$, e selecionado $\Delta t_s/\tau = 10\,\mathrm{ms}$. Depois de fixar esta janela de amostragem temporal é necessário definir a frequência de amostragem f_s para captar as flutuações mais elevadas.

A identificação da contribuição dos modos individuais para o padrão do escoamento global é feita a partir da seguinte expressão para os valores próprios: $\lambda_i^\phi / \sum \lambda_i^\phi$. Se o dado que se analisa é a velocidade ($\phi = u$) o módulo dos valores próprios exprime a energia cinética. E assim E_i^ϕ é normalmente tratado como o modo de energia [157], representando a percentagem de contribuição do modo para o padrão global do escoamento. Esta magnitude de energia é utilizada agora para avaliar a sensibilidade à frequência de amostragem dos instantes.

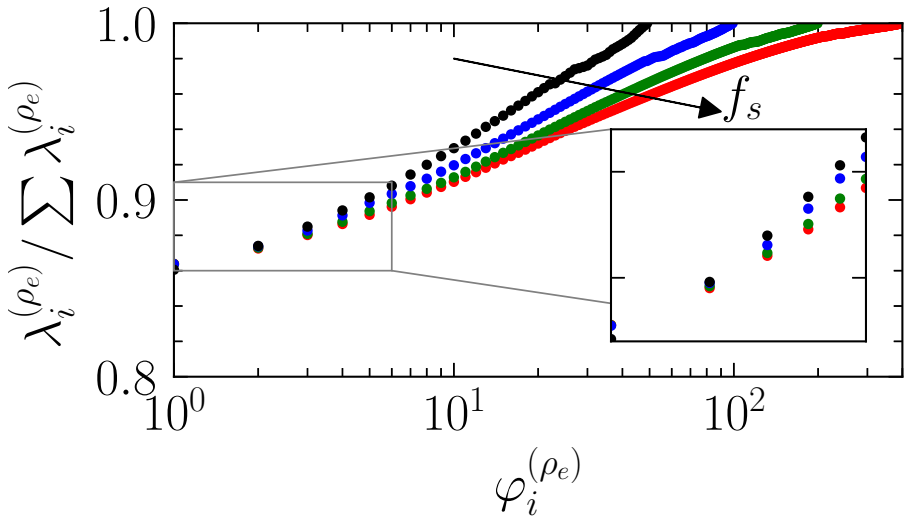
A frequência de amostragem é definida como $1/\delta t_s$, onde δt_s é o passo de tempo fixo entre os instantes sucessivos. É feito um teste de sensibilidade para o caso de teste com um caudal de entrada $83Q_0$, para quatro frequências de amostragem diferentes e, com elas, foi comparada a energia detida por cada modo, ver Figura 5.2. É possível observar que com um aumento na frequência de amostragem a energia começa a convergir para os pontos vermelhos, diminuindo a taxa da diferença. Os pontos a verde ($f_s = 25\mathrm{kHz} \rightarrow \delta t_s = 40\mu\mathrm{s}$) e os pontos a vermelho ($f_s = 50\mathrm{kHz} \rightarrow \delta t_s = 20\mu\mathrm{s}$) estão muito próximos, e para os primeiros seis modos (que são os mais energéticos) a diferença é inferior a 1%, veja-se na Figura 5.2 na caixa de ampliação. Os resultados mostram uma convergência da energia distribuída por modo. Isto significa que, aumentando o número de amostras temporais (aumentando a frequência da amostragem da solução), obteremos mais modos, captando assim mais modos de alta frequência que estão ligados ao ruído e à dinâmica caótica, mas captando menos energia por modo. [159].

Com a frequência de amostragem fixada no valor anteriormente discutido, calculamos agora as outras duas condições de caudal de entrada, ver Figura 5.3. A figura apresenta a energia acumulada dos valores próprios para a velocidade e para a densidade de carga elétrica, para cada condição de caudal de entrada. O aumento do caudal mostrou um aumento no número de modos necessários para obter 99% da energia total do escoamento. Para o caso de $83Q_0$, um grupo de 18 modos pode ser usado para reconstruir a parte mais significativa do campo de velocidade, mas, para as flutuações da densidade de carga elétrica, são necessários mais modos. Para obter 99% da energia das flutuações, para o caso de $83Q_0$, precisamos de 181 modos. No entanto, os 181 modos representam aproximadamente 45% do número de instantes utilizados para calcular os modos POD.

Os dois primeiros modos POD, para cada cálculo, são agora apresentados no campo espacial, na Figura 5.4 para a velocidade axial e na Figura 5.5 para a densidade de carga elétrica. Para ver as estruturas de flutuação o valor escalar é normalizado pelo valor máximo do respetivo campo. Esta normalização mostra o valor da flutuação da energia total

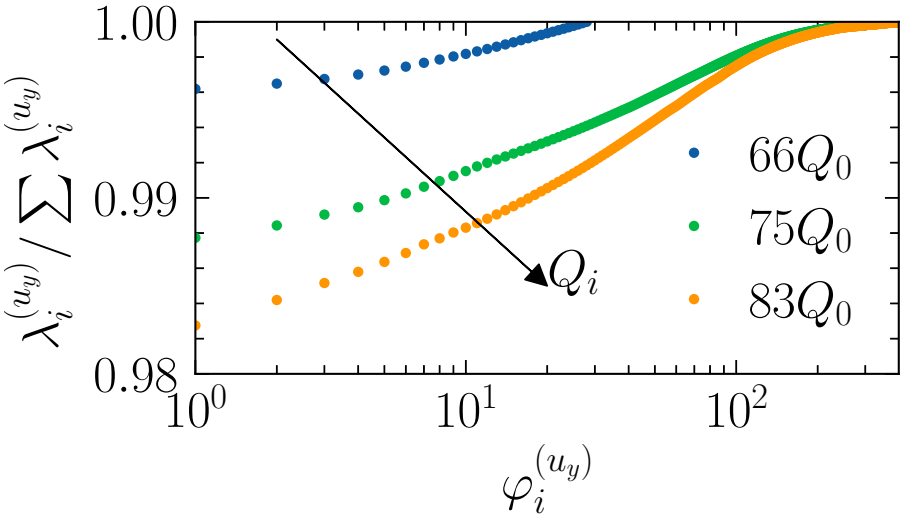


(a)

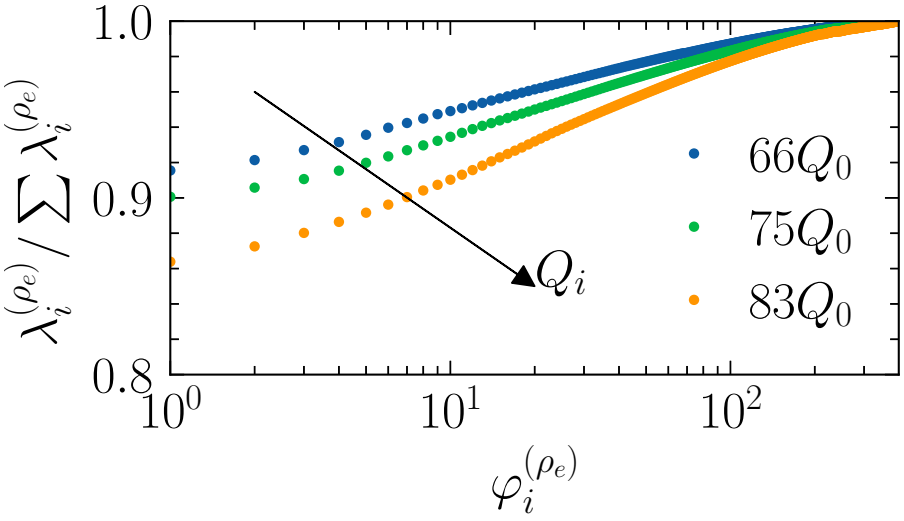


(b)

Figura 5.2: Teste de sensibilidade para os autovalores de energia dos modos POD, para diferentes números de Stroudal de amostragem $St_s = f_s D_i / u_i^E$ iguais a 0,053 (preto), 0,106 (azul), 0,212 (verde) e 0,424 (vermelho). Resultados para um caudal de entrada fixo igual a $83Q_0$, $f_s = 1/\delta t_s$ é a frequência de amostragem de um intervalo de tempo fixo igual a 8 ms.



(a)



(b)

Figura 5.3: Energia acumulada do valor próprio λ_i para a (a) velocidade axial e (b) densidade de carga elétrica, para os cinco modos POD mais importantes e distintos.

Tabela 5.1: Resumo da energia do POD, com o $\varphi_i^{\phi}(E_i \approx 99\%)$ como o modo em que a energia acumulada dos modos atinge 99% de toda a energia neles contida, e $E^{\phi}_{(1+2)}$ como a fração da energia acumulada contida no primeiro e segundo modos.

Q_i/Q_0	$E_i^u \approx 99\%$	$E_i^{\rho_e} \approx 99\%$	$E^u_{(1+2)}$	$E^{\rho_e}_{(1+2)}$
66	$i = 1$	$i = 124$	1.00	0.92
75	$i = 6$	$i = 151$	0.99	0.91
83	$i = 18$	$i = 181$	0.98	0.87

do modo. Os campos de energia cinética são coloridos pelas flutuações numa faixa de $\pm 50\%$ do máximo.

O comprimento de onda da base específica pode ser observado a partir da distância axial de dois nós consecutivos da mesma cor. O segundo modo POD (φ_2) mostra que o comprimento de onda da flutuação progride com o aumento do caudal de entrada. Devemos notar que este segundo modo é a flutuação mais energética uma vez que os modos são ordenados pelo conteúdo energético. Em relação ao primeiro modo vemos que não tem um valor negativo, o que significa que é uma entrada constante de energia e não uma flutuação, sendo, portanto, uma representação do escoamento médio do jato.

Comparando as primeiras bases, da velocidade e da densidade de carga elétrica, é possível notar que, para a velocidade, o maior transporte de energia cinética é feito na região próxima do exterior do jato. Em contrapartida, o transporte da energia retida no transporte do ρ_e é feito, na sua maioria, na região da interface. Isto é consequência da acumulação de carga elétrica na interface.

A tabela 5.1 apresenta um resumo da energia extraída pelo POD. Para o campo de velocidade, a representação de 99% das flutuações do campo é feita por muito poucos modos do POD. Isso ocorre porque as flutuações do campo de velocidade são muito baixas, já que se trata de um jato laminar, com números de Reynolds muito baixos. A dinâmica não-linear do escoamento é mantida pela carga elétrica, o que faz com que seja necessário um número muito maior de modos POD para descrever os mesmos 99% da energia do campo de escoamento.

A partir dos valores próprios e dos vetores próprios é possível determinar os coeficientes dependentes do tempo $a_i(t)$, que são os coeficientes de expansão [160]. Este coeficiente temporal pode ser utilizado para calcular o espetro de frequência caraterístico do escoamento. Para cada modo existe um coeficiente dependente do tempo a_i e, para estes, foi feita uma análise PSD para obter a frequência mais energética para cada propriedade do escoamento [161]. Com caudais de entrada mais baixos as frequências do escoamento ficam mais dispersas. Estes coeficientes permitem a caraterização temporal do escoamento, e, portanto, a previsão da sua dinâmica temporal.

As frequências associadas aos modos POD podem ser obtidas por uma análise PSD dos coeficientes temporais, como se mostra na Figura 5.6. Para a velocidade, as frequências associadas ao segundo modo são $\{0{,}877;\ 2{,}005;\ 22{,}807\}$ kHz e para a carga elétrica as frequências $\{8{,}521;\ 20{,}551;\ 22{,}807\}$ kHz, respetivamente para os caudais de entrada $\{66; 75; 83\}Q_0$. Como o escoamento é essencialmente periódico, os modos espaciais aparecem em pares, de modo que os modos têm os respetivos conjugados. Por exemplo, o

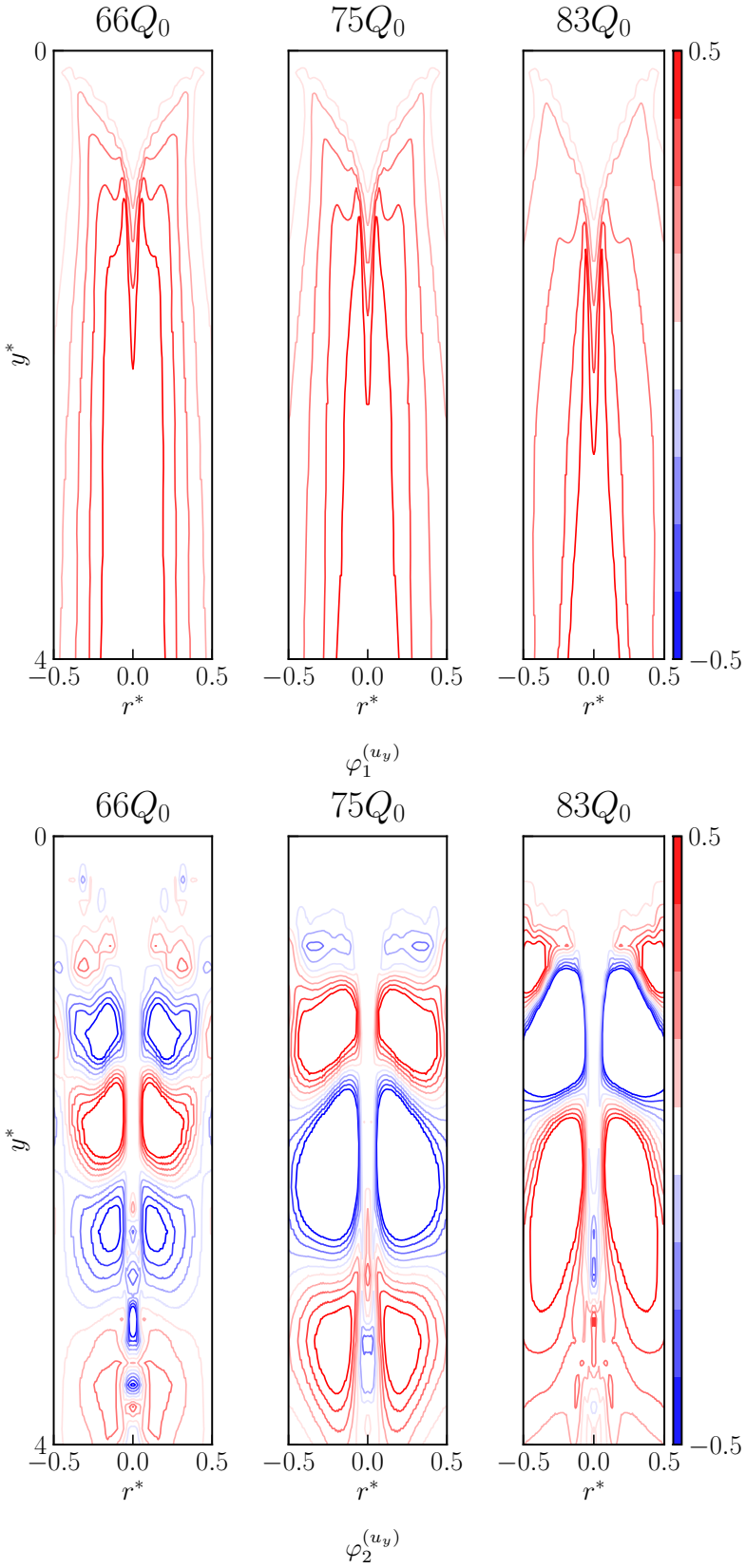


Figura 5.4: Campo normalizado espacialmente do primeiro e segundo modo POD (φ_1 e φ_2 respetivamente) para as flutuações de velocidade axial.

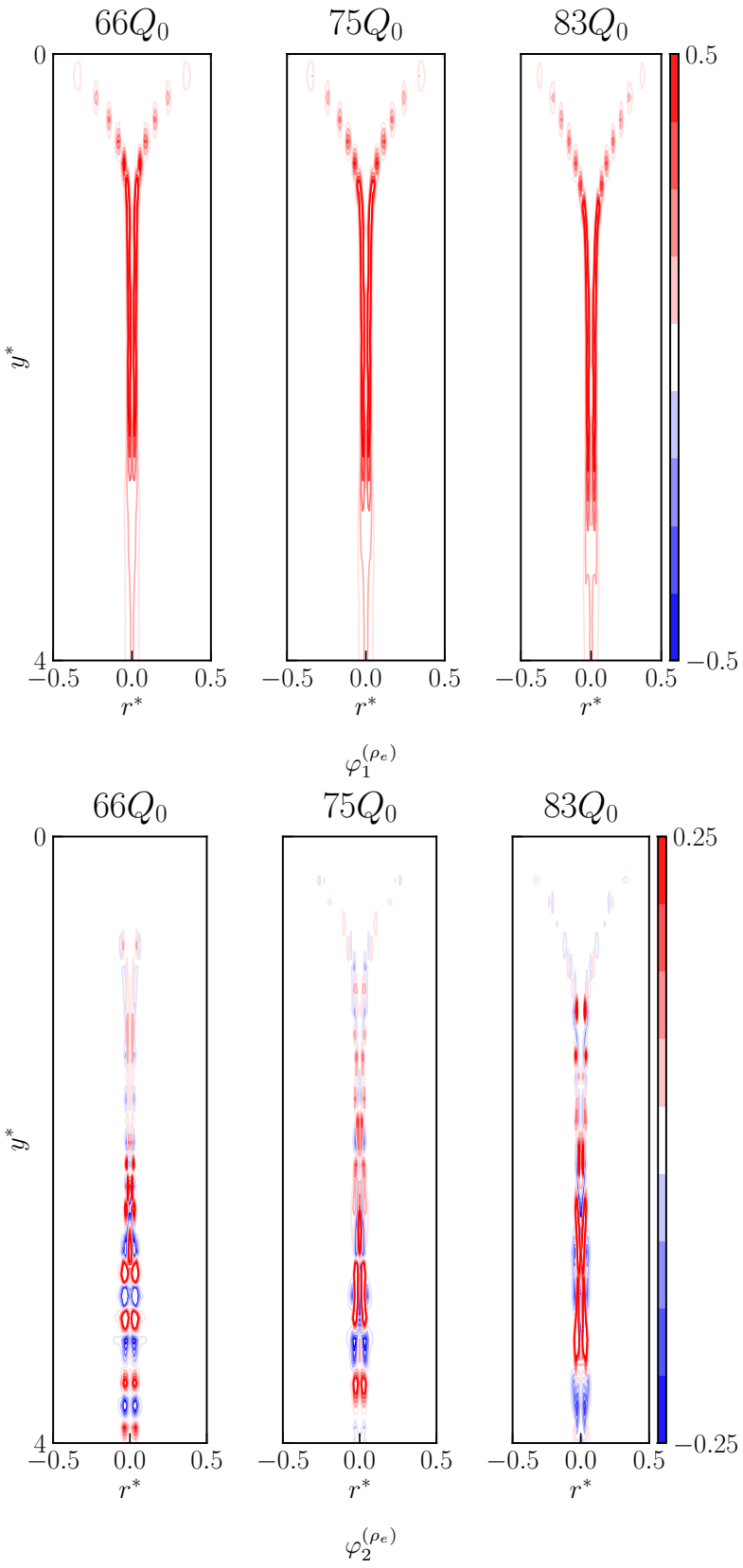
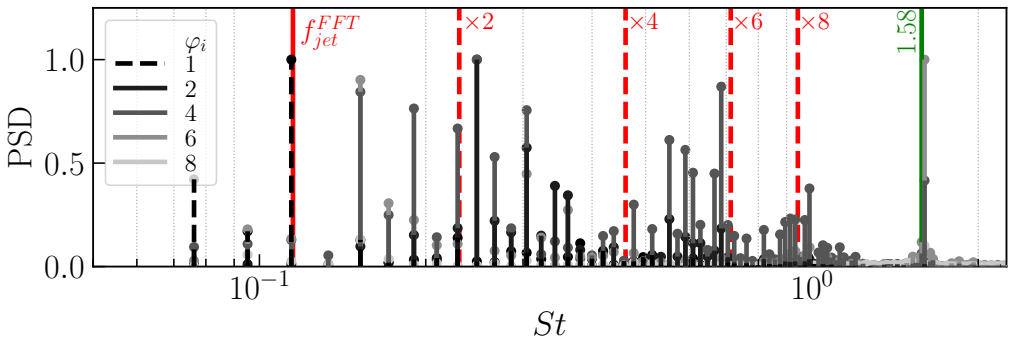
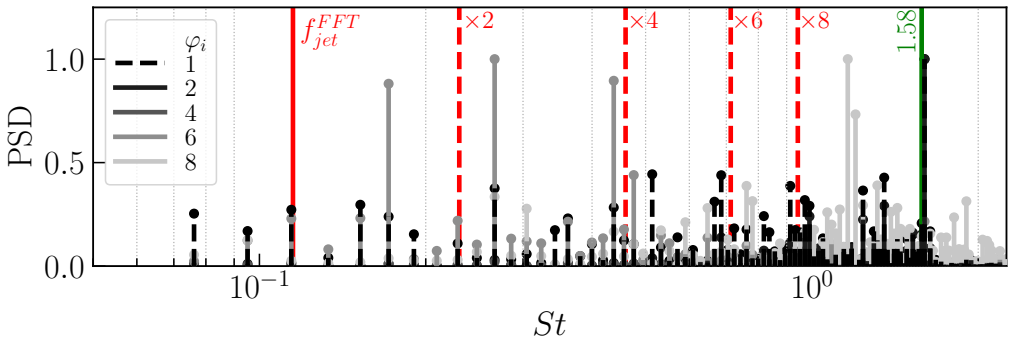


Figura 5.5: Campo normalizado espacialmente do primeiro e segundo modos POD (φ_1 e φ_2 respetivamente) para as flutuações da densidade de carga elétrica.



(a) PSD dos primeiros 8 modos da velocidade.



(b) PSD dos primeiros 8 modos da densidade de carga elétrica.

Figura 5.6: Análise PSD dos coeficientes temporais dos primeiros oito modos POD. Resultados para o caso de $83Q_0$ e $37\phi_{e,0}$ e para os campos (a) u_y e (b) ρ_e. A linha vermelha representa a frequência obtida na secção anterior a partir da análise FFT do comprimento do jato e as linhas a traço interrompido as imagens correspondentes.

φ_2 e o φ_3 são um par. Podemos ver que o método POD capta a frequência da flutuação do jato, e esta está relacionada com a emissão da gota como vimos anteriormente. O primeiro modo, como podemos ver pela análise PSD, tem uma frequência baixa, e embora represente o escoamento médio está profundamente ligado à frequência do comprimento do jato. Isto acontece devido ao comportamento transiente do jato e é uma das razões pelas quais utilizamos uma não subtração da média.

5.1.4 Decomposição de Modos Dinâmicos (DMD)

Em comparação com o POD, a decomposição de modos dinâmicos (DMD) é uma técnica relativamente nova que surgiu do desejo de conhecer as estruturas físicas e os comportamentos dos sistemas dinâmicos diretamente a partir de dados medidos. O DMD é muitas vezes considerado uma extensão do método POD que o associa a uma análise de Fourier [161]. Ambos os métodos são modelos de análise orientados por dados e ambos podem captar as características dominantes do escoamento, no entanto, o DMD pode ser mais eficiente quando o escoamento tem estruturas de energia relativamente baixa (como podemos ver a partir do transporte de carga elétrica), mas compartilha a mesma frequência das estruturas de maior energia, enquanto o método POD não pode captá-lo adequadamente. O método de decomposição DMD depende de componentes complexos, onde um é a variação espacial e o outro a variação temporal. O DMD é naturalmente baseado nos modos de Koopman que representam estruturas do escoamento espacial com movimento periódico no tempo e que aqui dão usadas para caraterizar a dinâmica do escoamento não linear oscilatório.
Existem muitas variações da técnica DMD, neste trabalho usamos o cálculo padrão através da decomposição em modos de Koopman, usando o método originalmente proposto em [154]. Os modos de Koopman, usam a teoria do operador de Koopman que usa uma transformação de variáveis para converter um sistema dinâmico não linear de dimensão infinita num sistema dinâmico linear, possivelmente de dimensão finita.
Em comparação com o método POD, o DMD divide a matriz de *snapshot*, ou seja, duas deslocações no tempo, por um passo de tempo fixo δt_s,

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \boldsymbol{S}_1 & \boldsymbol{S}_2 & \cdots & \boldsymbol{S}_{n-1} \\ | & | & & | \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{S}' = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ \boldsymbol{S}_2 & \boldsymbol{S}_3 & \cdots & \boldsymbol{S}_{n} \\ | & | & & | \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

O conceito de DMD envolve encontrar um operador linear $\boldsymbol{A}$ para que estas duas matrizes possam ser relacionadas, assim,

$$\mathbf{S}' = \mathbf{A}\mathbf{S}, \quad (5.7)$$

onde o operador linear $\mathbf{A}$ mapeia as colunas das duas matrizes. Este método de decomposição calcula os valores próprios do sistema de elevada dimensão (a matriz de dimensão

completa) num domínio complexo, onde estes têm uma componente real e uma componente imaginária. Esta solução pode ser resumida pela projeção da matriz **A** como,

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{F}\mathbf{U}^{*}, \quad (5.8)$$

em que a matriz $\boldsymbol{U}$ é obtida a partir da SVD de **S** e $*$ representa a transposição complexa conjugada. A matriz $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{r\times r}$, sendo r a classificação da matriz dos instantes, pode ser determinada a partir das matrizes dos instantes mas minimizando o problema usando uma otimização por mínimos quadrados,

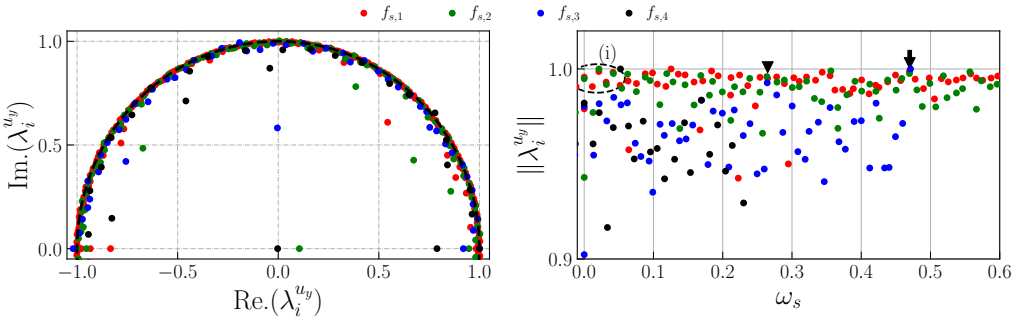
$$\underset{F}{\text{minimize}} \quad \|\mathbf{S}' - \mathbf{U}\mathbf{F}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^{*}\|_F^2, \quad (5.9)$$

em que $\|\cdot\|_F$ é a norma de Frobenius.
A decomposição no domínio da frequência é a razão pela qual este método pode ser fiável para calcular numericamente as frequências características do escoamento. O procedimento e a formulação matemática estão bem descritos e detalhados em [161], mas a ideia foi originalmente introduzido em [154]. Em casos complexos, ou quando se utilizam dados experimentais, o ruído pode facilmente interferir nos resultados. Os modos DMD que representam características físicas do escoamento são os que são marginalmente estáveis. À semelhança da transformada de Fourier temporal, as frequências resolvidas pelo DMD estão limitadas a $2f_s$, em que f_s é a frequência de amostragem dos dados. Se os modos forem fisicamente relevantes, eles aparecerão para diferentes valores de frequência, mesmo que a amplitude tenha pequenas diferenças. Se não aparecerem de forma consistente em diferentes conjuntos de dados, então são considerados espúrios e não significativos [162, 153].

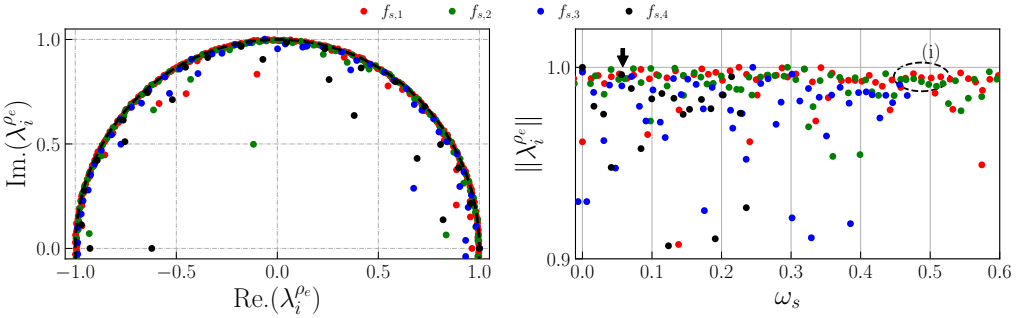
5.1.4.1 Calibração do método DMD

Este método também se baseia no cálculo do SVD para a redução do conjunto de instantes à sua matriz reduzida que é composta por um conjunto de vetores linearmente independentes. A fim de remover as redundâncias espaciais que podem aparecer na decomposição modal e captar as principais estruturas coerentes do escoamento, é efetuada uma calibração inicial. Este passo é importante para obter resultados robustos e exatos. Para a calibração usamos o HODMD (*Higher order dynamic mode decomposition*) que é especialmente otimizado para dados ruidosos e escoamentos complexos [163]. Este método é uma expansão do DMD [154]. A principal propriedade do HODMD é a introdução de uma janela deslizante, esta consiste no deslizamento da matriz de instantes em d linhas, razão pela qual também é chamado de método *DMD-d* [164]. A nossa calibração do método DMD-d baseia-se nos seguintes passos,

1. **Sensibilidade à frequência de amostragem**. São testadas diferentes frequências de amostragem para determinar a frequência mínima necessária para obter as



(a) Valores próprios dos modos DMD para o campo da velocidade.



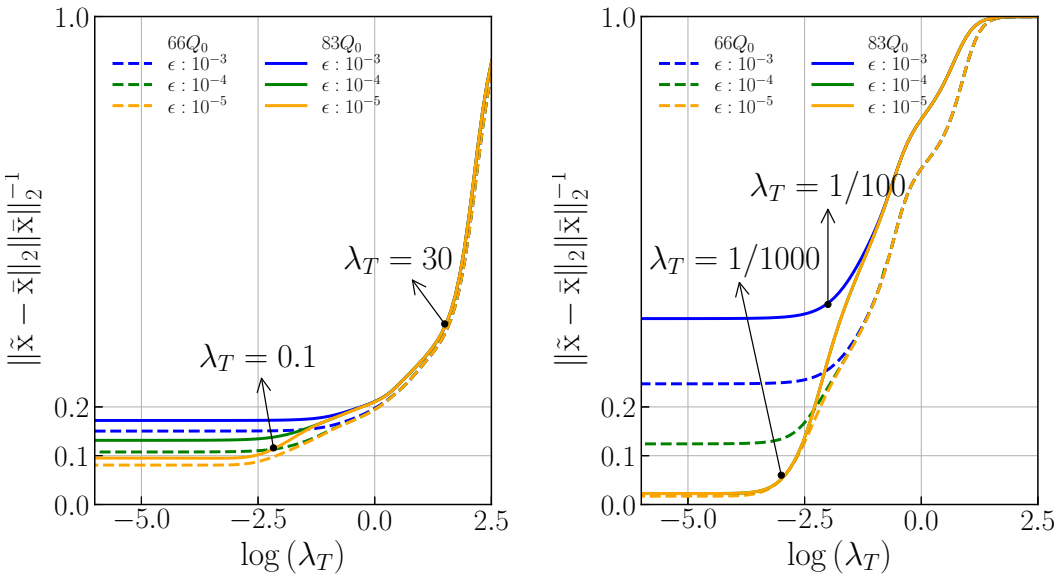
(b) Valores próprios dos modos DMD para o campo da densidade de carga elétrica.

Figura 5.7: Teste de sensibilidade dos valores próprios de energia, para os modos DMD nas diferentes frequências de amostragem. As frequências de amostragem são $f_s = \{f_{s,1}; f_{s,2}; f_{s,3}; f_{s,4}\} = \{50; 25; 12{,}5; 6{,}25\}$ kHz.

flutuações de caudal características, este é o *teste de sensibilidade*.

O teste de sensibilidade é efetuado para as mesmas frequências de amostragem testadas para o método POD $\{f_{s,1}; f_{s,2}; f_{s,3}; f_{s,4}\}$. A decomposição DMD fornece os valores próprios que estão num domínio complexo e que são representados em Figura 5.7. Nas decomposições DMD é possível medir a estabilidade e a periodicidade dos valores próprios. A estabilidade é medida analisando a posição do autovalor em relação ao círculo unitário do domínio complexo. Para cada modo, a distância do valor próprio ao círculo unitário estável é calculada como $1 - \|\lambda_i^{\phi}\|$. Está bem estabelecido na teoria dos sistemas dinâmicos que os valores próprios que se encontram dentro do círculo unitário são estáveis, os que se encontram fora são instáveis e os que se encontram dentro do círculo unitário são marginalmente estáveis. Estes últimos são muito interessantes para nós porque são os que são transpostos ao longo do tempo infinito. Definimos que um valor próprio é marginalmente estável se o seu $\|\lambda_i^{\phi}\|$ tem menos de 3% de desvio do círculo unitário. Para o campo de velocidades, Figura 5.7a, a percentagem de modos que se encontram nesta região é de $\{95{,}99; 94{,}47; 76{,}77; 55{,}10\}\%$, respetivamente para as frequências de amostragem $\{f_{s,1}; f_{s,2}; f_{s,3}; f_{s,4}\}$. Da mesma forma para o campo de carga elétrica, Figura 5.7b, a percentagem de modos é $\{95{,}74; 82{,}96; 77{,}78; 59{,}18\}\%$. Repare-se que a diferença entre as frequências $f_{s,1}$ e $f_{s,2}$ é inferior a 3%, sendo pouca em comparação com as frequências mais pequenas $f_{s,3}$ e $f_{s,4}$.

2. **Redução de dimensão.** Aqui tratamos da regularização do núcleo da matriz de



(a) u_y. (b) ρ_e.

Figura 5.8: Erro de aproximação da matriz em função de diferentes parâmetros de Tikhonov e diferentes tolerâncias do cálculo da SVD.

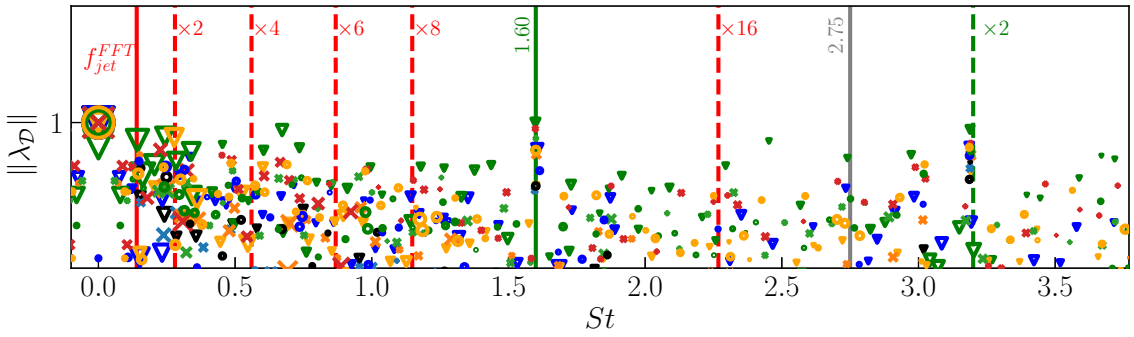
dados e respetiva tolerância ao cálculo de SVD. Em primeiro lugar o método de regularização é a regularização de Tikhonov. Este tipo de regularização é um dos métodos possíveis para reduzir o ruído dos sinais de modo a captar os verdadeiros modos físicos. Para reduzir o ruído o modelo usado para a regularização de Tikhonov utiliza a minimização da matriz da solução com um termo de penalização, e este é uma função do parâmetro de Tikhonov λ_T [165]. Esta regularização pode ser obtida a partir da resolução do seguinte problema de otimização,

$$\underset{\boldsymbol{b}}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{m}\|_2^2 + \lambda_T \|\mathbf{L}_2\mathbf{b}\|_2^2 \quad (5.10)$$

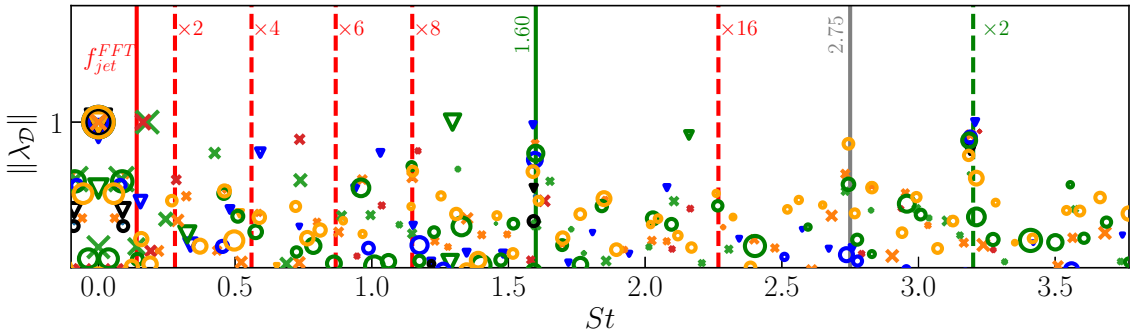
Onde se procura o argumento que minimiza a função (argmin). Para isso precisamos de determinar a melhor tolerância para o cálculo da SVD, ε_1. Isto é feito mantendo os valores singulares para cada $\lambda_i/\lambda_1 \leq \varepsilon_1$. Efetuámos este teste truncando a matriz de classificação SVD com tolerâncias $\varepsilon_1 = 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$ e diferentes λ_T na regularização de Tikhonov;

Para a calibração do parâmetro de Tikhonov precisamos de encontrar o cotovelo da curva [166] da norma de erro de aproximação, dada como $\mathbf{L}_2^m = \|\tilde{\mathrm{x}} - \bar{\mathrm{x}}\|_2 \|\bar{\mathrm{x}}\|_2^{-1}$, em que $\bar{\mathrm{x}}$ é a matriz dos instantes do FOM, $\tilde{\mathrm{x}}$ é a reconstrução da matriz com o algoritmo e $\|\cdot\|_2$ é a norma euclidiana. A figura 5.8 mostra o erro de aproximação para estes diferentes parâmetros. Notamos que a aproximação para a densidade de carga elétrica tem uma presença de ruído, tendo uma diferença maior em comparação com o do campo de velocidade.

3. **Deslizamento temporal**. O passo final da calibração é usar uma janela deslizante



(a) Amplitudes dos modos DMD normalizados do campo da velocidade u_y.



(b) Amplitudes dos modos DMD normalizados para a densidade de carga elétrica ρ_e.

Figura 5.9: Amplitudes normalizadas dos modos DMD para diferentes calibrações de tolerância $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \{10^{-5}; 10^{-4}; 10^{-3}\}$ (correspondendo às marcas $\triangle; \times; \circ$) e deslizamento de tempo $d = \{1; 4; 6; 8\}$ (correspondendo às cores preto, verde, azul, laranja).

no tempo, usando o método *DMD-d*, (detalhes em [163, 153]). Utilizamos diferentes valores de d, com todos os diferentes parâmetros e analisamos a amplitude dos modos DMD no espetro de frequência, ver Figura 5.9. Depois de obter os modos DMD é definido um limiar ajustável ε_2, que impõe que a amplitude reduzida normalizada do modo seja superior à tolerância. Com esta análise captamos novamente a frequência do jato (representada numa linha vermelha) e também a frequência $1.6St$. Conclui-se a partir dos modos DMD da densidade de carga elétrica, que uma frequência elevada de $\approx 2.8St$ parece ser o modo ligado à flutuação da emissão de gotículas.

Após realizar a calibração podemos observar as estruturas espaciais dominantes que são capturados pelas frequências indicadas acima, veja-se as Figuras 5.10 e 5.11. Observe-se como se consegue captar o modo de estado estável (que se assemelha ao primeiro modo POD), enquanto o $2.8St$ capta a flutuação na região da emissão de gotículas. Podemos afirmar que uma frequência altamente dominante que caracteriza a estabilidade do jato líquido e outra frequência mais elevada que se relaciona com a emissão de gotículas.

5.1.4.2 Outras Condições de Funcionamento

Para a frequência de amostragem fixa $f_{s,1}$ foram testadas as outras duas condições de caudal de entrada para observar as suas diferenças. O mesmo procedimento é feito para os valores próprios que são mapeados no domínio complexo e cuja distância ao círculo

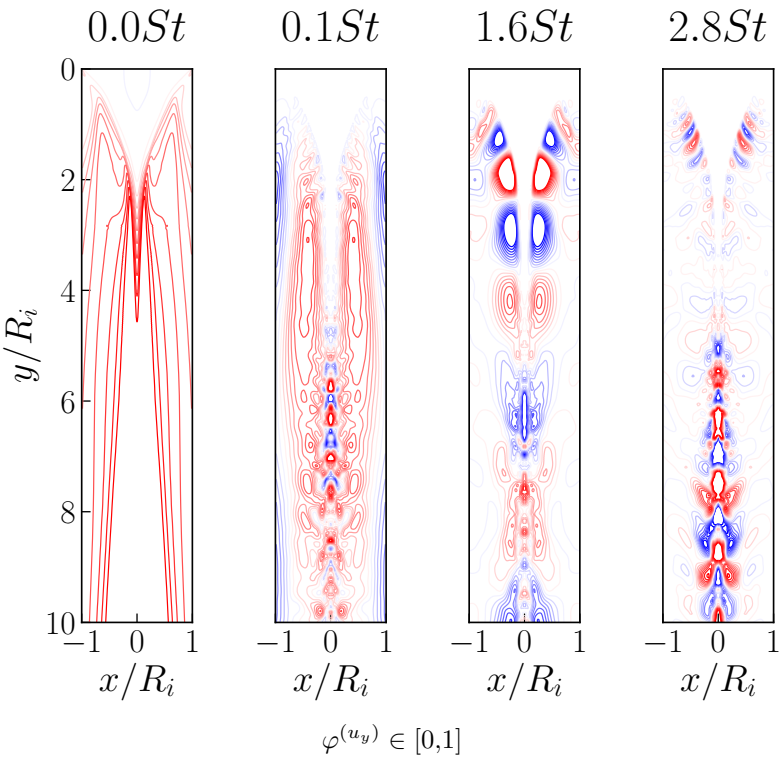


Figura 5.10: Campo normalizado espacialmente de frequências características do modo DMD. Normalização pelo valor máximo do campo.

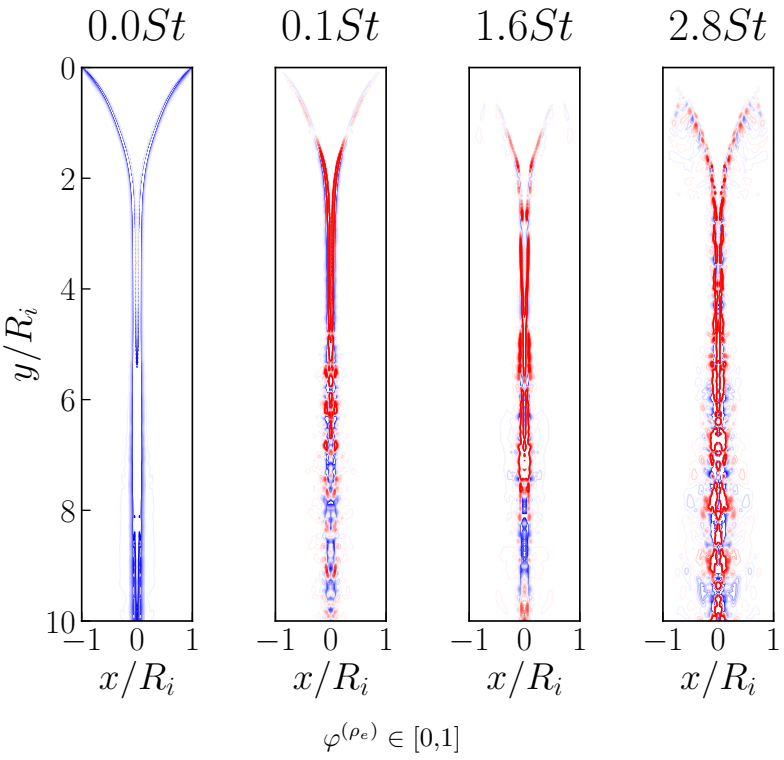


Figura 5.11: Campo normalizado espacialmente das frequências características do modo DMD. Normalização pelo valor máximo do campo.

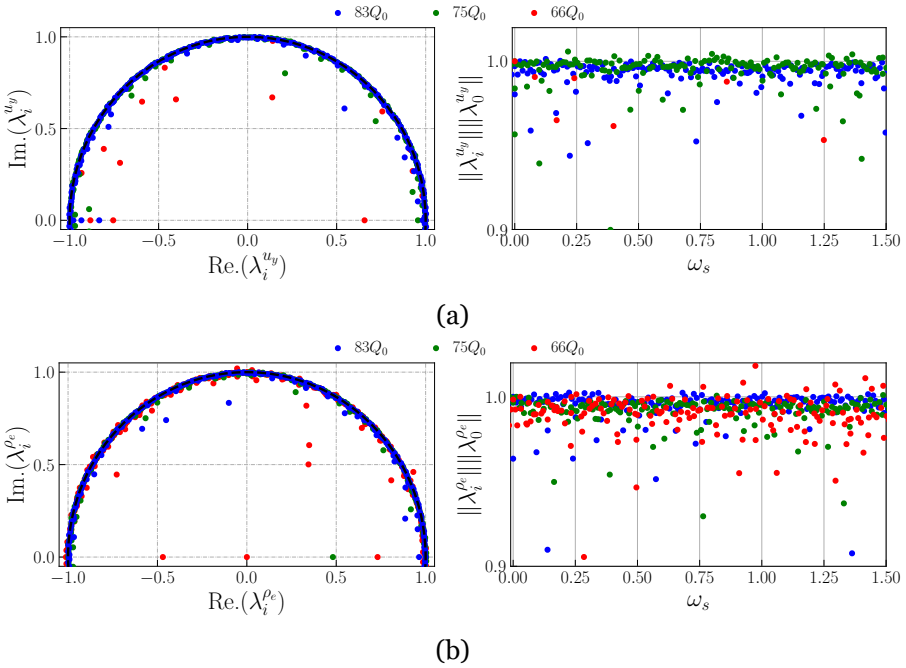


Figura 5.12: Valores próprios do método DMD e o desvio normal do círculo unitário, para (a) a velocidade axial e (b) a flutuação do campo da densidade de carga elétrica.

unitário é determinada, Figura 5.12a. Para o campo de velocidades, Figura 5.12a, a percentagem de modos que se apresentam com desvio inferior a 3% do círculo unitário são $\{95{,}99;\ 96{,}24;\ 25{,}00\}\%$, respetivamente, para os caudais de entrada $\{83;\ 75;\ 66\}Q_0$. Da mesma forma, para a densidade de carga elétrica, e a partir da Figura 5.12b, as percentagens são $\{95{,}74;\ 97{,}74;\ 93{,}73\}\%$.

Este método não é regulado pela energia dos modos, mas pela ortogonalidade da frequência. Para extrair os modos DMD importantes selecionámos os valores próprios mais energéticos e com maior norma, maximizando assim $E_i^{\phi}\|\lambda_i^{\phi}\|$. Este cálculo só tem em conta os valores próprios estáveis (dentro do círculo unitário) e o primeiro modo também não é tido em conta. Para os modos de extração de velocidade selecionámos as frequências $\{21{,}053;\ 8{,}020;\ 4{,}511\}$kHz e para a carga elétrica as frequências $\{12{,}281;\ 11{,}028;\ 3{,}885\}$ kHz, respetivamente para os seguintes caudais de entrada $\{66,\ 75,\ 83\}Q_0$.

5.1.5 Modelos de Ordem Reduzida baseados em POD

A fim de demonstrar a construção de um modelo de ordem reduzida (ROM) baseado na interpolação dos modos do POD é utilizada a definição do POD-ROM por projeção Galerkin padrão [167]. A reconstrução da matriz ROM é baseada na Figura 5.5. Assim, a velocidade transiente e a densidade de carga elétrica são definidas, para um número de modos N, como,

$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i,t) = \boldsymbol{\phi}_s(\boldsymbol{x}_i) + \sum_{i=1}^{N} a_i(t)\boldsymbol{\phi}_i(\boldsymbol{x}). \quad (5.11)$$

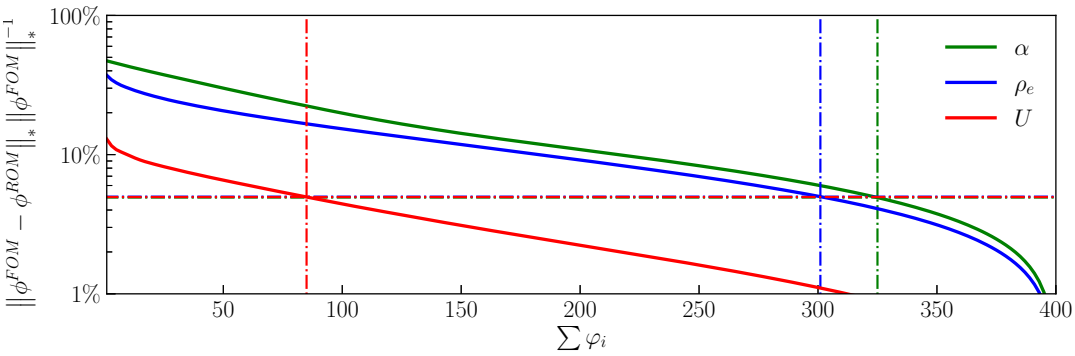
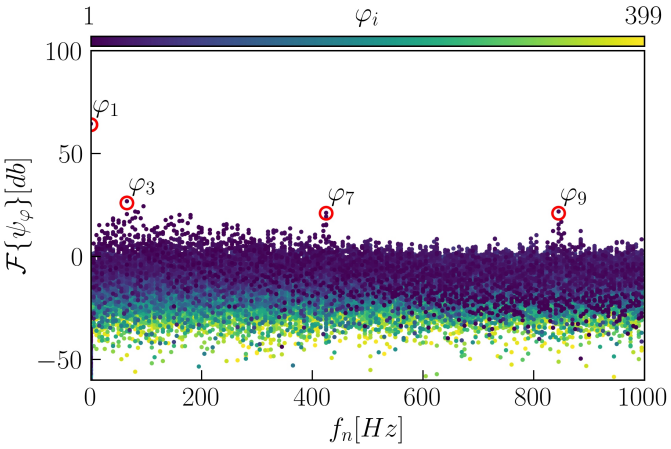


Figura 5.13: Erro relativo global da projeção ROM e a solução FOM obtida através da norma do núcleo da matriz. As linhas a traço interrompido mostram a posição para qual o erro é 5%.

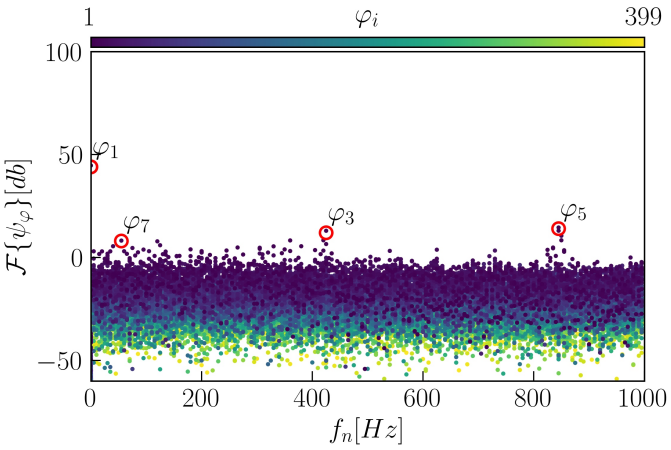
Onde $a_i(t)$ é o coeficiente de tempo (pelos coeficientes de correlação entre os modos) do modo POD $\boldsymbol{\phi}_i(\boldsymbol{x})$. Efetuando a reconstrução do campo para a velocidade, para a densidade de carga elétrica e, finalmente, para a fração de fase, podemos comparar os resultados do FOM com o ROM calculando a diferença relativa entre a norma do núcleo das matrizes completas. Este erro relativo é apresentado na Figura 5.13. Embora tenhamos visto que os primeiros modos têm 99 da *energia* do escoamento, a soma do erro transiente total sugere claramente que precisamos de mais graus de liberdade na reconstrução do modelo para capturar completamente as flutuações do jato de fluido.
Assim, podemos concluir que precisamos de um número de modos de 80 para o campo de velocidade e de um número de modos de 300 para a densidade de carga elétrica. Esta diferença baseia-se no facto de a flutuação da carga elétrica ser muito maior do que a da velocidade, como já foi referido. Com este conjunto de modos podemos analisar as frequências que são inerentes aos modos POD. Esta análise é apresentada na Figura 5.14, que mostra todas as frequências em todos os modos. Repare que o $F\{\psi_\varphi\}$ é expresso como $20\log_{10}(\psi_{\varphi_i})$, onde ψ_{φ_i} é o coeficiente temporal do modo POD i. Como vemos na Figura5.14a, os modos assinalados U são $\varphi : \{1;3;7;9\}$; e $f_n : \{0.0;65.0;425.0;845.0\}$. Para o ρ_e, Figura 5.14b, os modos assinalados são $\varphi : \{1;3;5;7\}$, e $f_n : \{0.0;425.0;845.0;55.0\}$. Depois de analisar a energia e as frequências dos modos POD reconstruimos o campo de velocidade (ver a Figura 5.15) e a densidade de carga elétrica (ver a Figura 5.16). Para comparação, os campos são normalizados com a norma L_1 e um contorno de diferença é desenhado. A Figura 5.15 mostra claramente que a reconstrução da região do cone de Taylor (intervalo de $y/R_i = \forall[0,5]$) tem uma diferença muito pequena e na região de quebra (intervalo de $y/R_i = \forall[0,5]$) o erro é significativo. No caso da densidade de carga elétrica (ver a Figura 5.16), a diferença é quase igual em todas as gamas, e o modelo de ordem reduzida consegue efetivamente captar todas as flutuações de carga à superfície do líquido e na gama de volume.

5.1.6 Observações Finais

Neste ponto foi efetuada uma análise POD para o jato que compara as variações da velocidade axial e da densidade de carga elétrica. A velocidade axial transporta o jato de forma quase uniforme, uma vez que é necessário um pequeno número de modos POD



(a) U



(b) ρ_e

Figura 5.14: Análise no domínio da frequência dos componentes temporais para os n-ésimos modos POD, respetivamente para as flutuações do campo da: (a) velocidade; (b) densidade de carga elétrica.

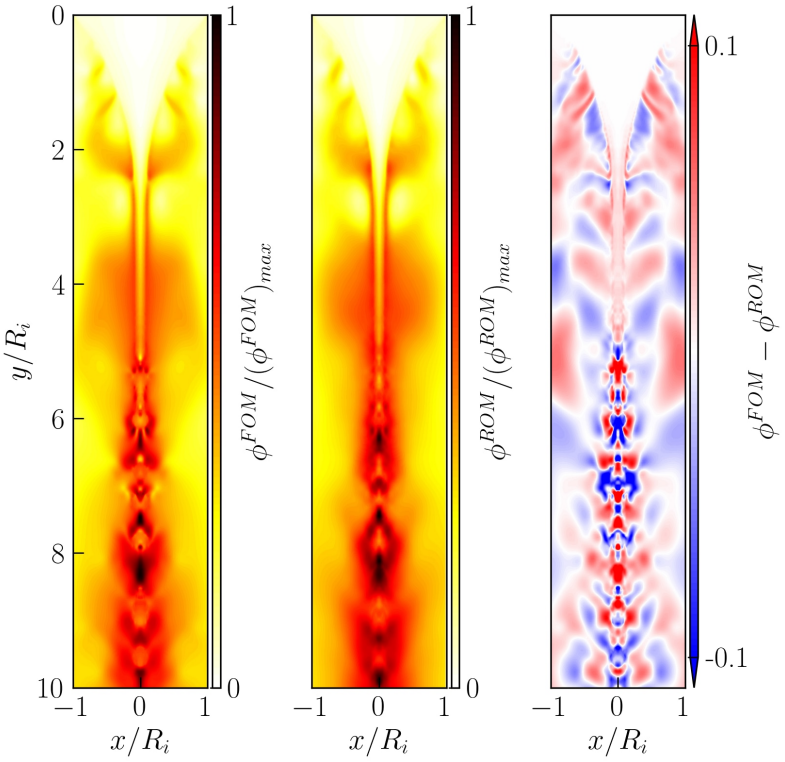


Figura 5.15: Comparação de um instante do *FOM* e do *ROM* para o campo de velocidade. Os campos ϕ são normalizados com a norma L_1.

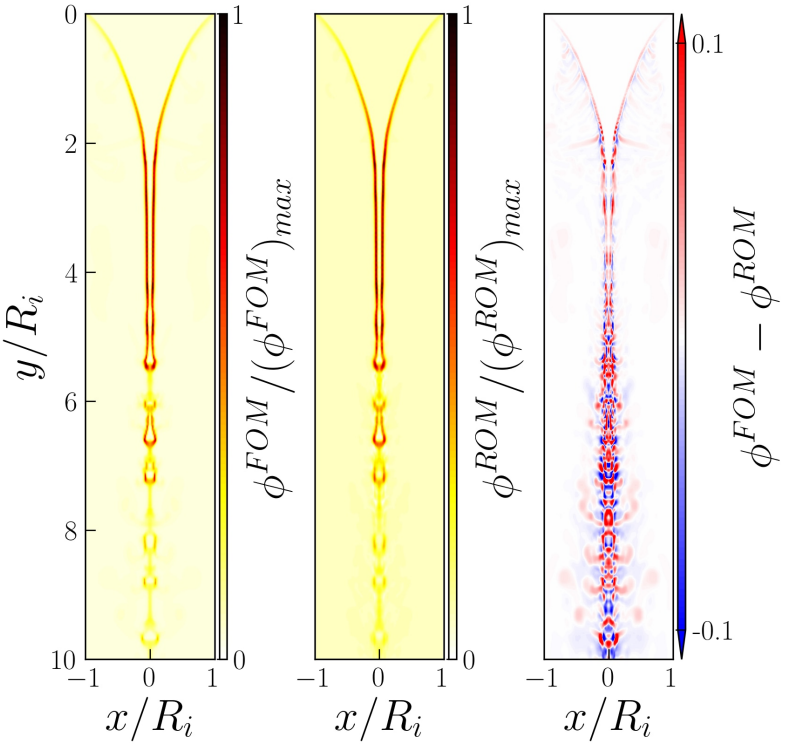


Figura 5.16: Comparação de um instante do *FOM* e do *ROM* para o transporte da densidade de carga eléctrica. Os campos ϕ são normalizados com a norma L_1

.

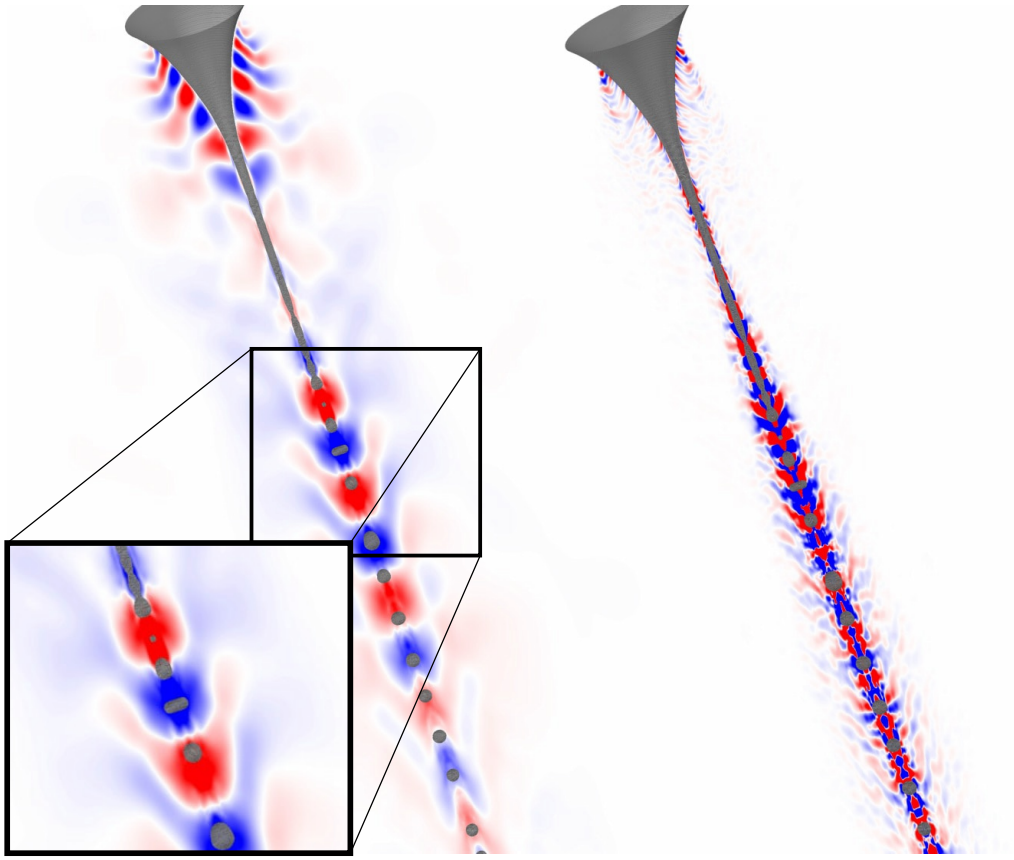


Figura 5.17: Visualização do jato líquido e dos modos para a velocidade e para a carga elétrica.

para obter 99% de energia cinética. As flutuações do escoamento, especialmente a quebra do jato, são representadas pelas flutuações da densidade de carga elétrica transportada pelo campo de velocidade e pelo campo elétrico externo. A dinâmica da carga elétrica no campo é inseparável da dinâmica da flutuação do jato e da formação de gotículas.

A Figura 5.17 demonstra a análise modal aplicada ao campo da velocidade (esquerda) e campo da carga elétrica (direita) de escoamento de um jato EHD.

Este tipo de simulação numérica permite-nos analisar o escoamento com os métodos POD e DMD e oferece a vantagem de uma frequência de amostragem elevada. As frequências predominantes foram mostradas para diferentes velocidades de entrada e a sua ligação com os modos decompostos do escoamento foi também apresentada. Mostra-se que a energia cinética do escoamento pode ser reduzida a apenas $4{,}5\%$ dos modos decompostos, representando 99% da energia do escoamento. No entanto, reduzir a ordem da transição da densidade de carga elétrica é um desafio, pois neste caso a energia acumulada atinge 99% com 45% dos modos decompostos. Isso significa que o escoamento de dimensão mais elevada da velocidade pode ser expresso com precisão com muito poucos modos, comprimindo o campo e reduzindo-o para representar o escoamento. Comparando as frequências captadas pelo POD e pelo DMD com a FFT para o comprimento do jato de fluido, verifica-se que o DMD do campo elétrico capta frequências próximas da análise FFT. A decomposição modal do campo de velocidades representa a dinâmica do *vento iónico* e a decomposição da densidade da carga elétrica representa a dinâmica do jato

líquido.
Em resumo, propusemos, implementámos e usámos um modelo de ordem reduzida capaz de reproduzir o comportamento de um escoamento multifísico complexo envolvendo o transporte de carga elétrica no campo. A utilização de métodos de decomposição para analisar o comportamento dinâmico da emissão estável de gotículas a partir de jatos em cone de Taylor revela-se uma ferramenta muito eficaz. Os modos resultantes ilustram as diferentes estruturas espaciais associadas à aceleração do campo de velocidades e à distribuição da carga elétrica. Neste trabalho, tal como sugerido, mostrámos que as estruturas coerentes da dinâmica da quebra estão associadas ao comportamento da densidade de carga elétrica. Assim, pudemos demonstrar que a decomposição modal da evolução temporal da carga elétrica fornece a dinâmica dominante da emissão do jato.

5.2 Micro-propulsão coloidal [3]

Avanços recentes em propulsores de eletrospray revelaram o seu extraordinário potencial para uma variedade de aplicações aeroespaciais. Em particular, os propulsores de eletrospray coloidal fornecem uma nível de impulso sem precedentes e permitem o controlo sobre a posição e orientação de veículos ou estruturas espaciais. Os propulsores de eletrospray foram utilizados pela primeira vez no espaço em 2015 na missão Space Technology 7 (ST7), demonstrando uma duração de quase 2.500 horas de operação contínua. A sua vida útil acabou por ser limitada por diversos de fatores, incluindo a deposição de propelente nas grelhas dentro do propulsor. No futuro, os propulsores de eletrospray serão utilizados pela missão Laser Interferometer Space Antenna (LISA), uma missão de colaboração entre a Agência Espacial Europeia (ESA) e a NASA para a realização de medições de ondas gravitacionais [168]. Esta aplicação, extremamente interessante, permite que o meio contínuo possa ser utilizado para caracterizar a transição cone-jato e formação de gotas. Neste sentido iremos aqui propor a modelação computacional de um sistema de aceleração das gotas para aplicação em propulsão coloidal. Para além disso, também propomos a integração de modelos de aprendizagem automática para a otimização e criação de gémeos digitais neste tipo de simulação.

5.2.1 Proposta de grelha dupla de extração/aceleração

A presente investigação centra-se na aplicação da propulsão coloidal e, mais especificamente, na transição cone-jato e na aceleração de gotículas singulares. Esta aceleração de gotículas é uma primeira tentativa de criar um acoplamento optimizado na transição para a pluma de iões. Para tal estudámos o efeito da adição de uma segunda placa de aceleração, ver a Figura 5.18. Ao adicionar um novo passo de aceleração antes da formação da pluma, podemos controlar o impulso do sistema. Além disso, esta otimização e controlo da aceleração, será feita através da integração de modelos de aprendizagem automática com o objetivo de gerar um modelo substituto de baixa ordem, que pode fornecer informações sobre condições de funcionamento não testadas.

O bocal capilar, também designado por emissor, tem um diâmetro interior de D_i, um comprimento de L e um diâmetro exterior de D_o, o que define um limite de parede Γ_e. A parede do emissor está sujeita a um potencial elétrico externo fixo e igual a $\tilde{\phi}_e$. Uma placa de massa (Γ_g) com um diâmetro exterior de D_f, que tem um orifício circular centrado com um diâmetro D_o, é colocada a um potencial elétrico nulo. Esta placa está a uma distância (da ponta do emissor) igual a H. O diâmetro interno é o limite de saída Γ_o de onde as gotículas serão ejetadas. Na nossa investigação utilizámos diferentes conjuntos de condições de funcionamento, embora, uma vez que o nosso interesse principal é a aceleração das gotículas, tenhamos fixado o bocal emissor e as propriedades físicas do escoamento. As propriedades fixas para toda a simulação neste trabalho estão presentes na Tabela 5.2. Nestas investigações é utilizado o líquido condutor é "Heptano" com uma adição de 1,0%

[3] Resultados baseados no artigo S. Cândido and J. C. Páscoa, "Data-driven surrogate modelling of multistage Taylor cone–jet dynamics", *Physics of Fluids*, 2024. https://doi.org/10.1063/5.0205454

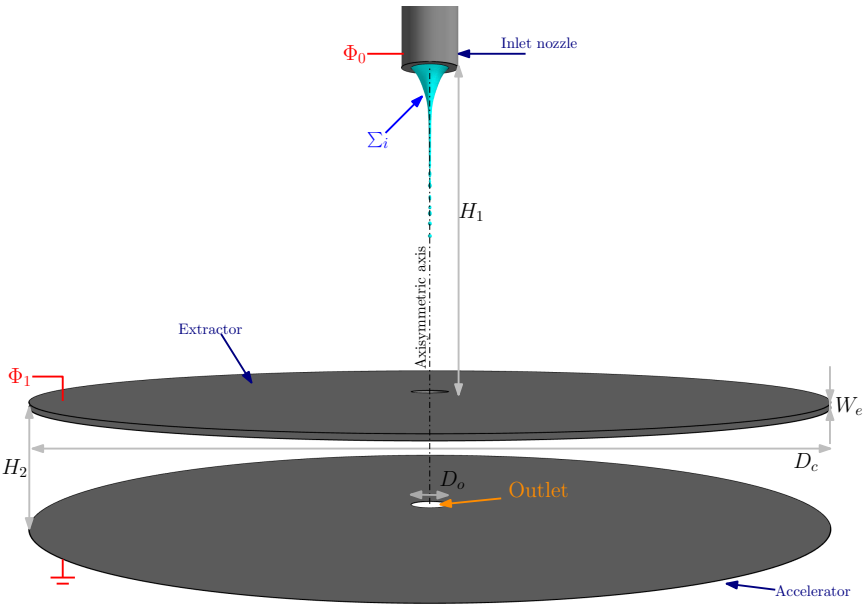


Figura 5.18: Esquema do caso de estudo, da transição cone-jato de Taylor e da emissão de gotículas, com grelha dupla.

de stadis. As propriedades hidrodinâmicas e elétricas podem ser encontradas na Tabela 5.2 [7, 48].

5.2.1.1 Detalhes numéricos do sistema com aceleração dupla

Para este estudo é utilizado o modelo já validado na Secção 4.1, para o jato axissimétrico. Note-se que a zona de extração é exatamente igual, o que está em estudo neste momento é a possível aceleração secundária que uma grelha adicional origina. Da mesma forma que o caso de base, a estabilidade é conseguida principalmente pelo estado da transição do cone para o jato, mantendo uma transição estável é possível ter uma forma estreita do histograma das condições de saída e, assim, a capacidade de manter o impulso do sistema de propulsão coloidal. Esta consideração é imprescindível para o desempenho do modelo de aprendizagem automática, para uma previsão mais robusta a estabilidade deve ser dada em função de 2 desvios da média, portanto 2σ. Para garantir isso, todos os cálculos foram feitos para uma janela temporal de 40 ms, para que se atinja a condição de estado estacionário periódico [115].

A diferença deste modelo para o anterior 2D é a adição da região de aceleração. A nova malha computacional pode ser vista na Figura 5.19. Nesta estão igualmente representadas as diferentes fronteiras do domínio de cálculo. O resumo das condições de fronteira aplicadas a cada uma é abaixo apresentados,

Tabela 5.2: Propriedades e constantes do problema, que incluem as propriedades hidrodinâmicas e elétricas [7] do sistema bifásico e respetivas propriedades geométricas.

	Propriedades físicas do líquido (L:Ω_1) e do meio Ar (M:Ω_2)	Valor	[unidade]
ρ_1	Massa específica - L	685	$[\mathrm{kg\,m^{-3}}]$
ρ_2	Massa específica - M	1.225	$[\mathrm{kg\,m^{-3}}]$
μ_1	Viscosidade - L	0.390	$[\mathrm{mPa\,s}]$
μ_2	Viscosidade - M	0.012	$[\mathrm{mPa\,s}]$
γ	Tensão superficial - L/M	0.021	$[\mathrm{N\,m^{-1}}]$
σ_1	Condutividade elétrica - L	4.5	$[\mathrm{\mu S\,m^{-1}}]$
σ_2	Condutividade elétrica - M	0.1	$[\mathrm{pS\,m^{-1}}]$
ε_1	Permissividade relativa - L	1.9	[-]
ε_2	Permissividade relativa - M	1.0	[-]
ε_0	Permissividade do vácuo	8.85	$[\mathrm{pF\,m^{-1}}]$
	Propriedades geométricas constantes		
D_i	Diâmetro interno	0.70	$[\mathrm{mm}]$
D_o	Diâmetro externo	1.05	$[\mathrm{mm}]$
D_n	Diâmetro furo do extrator/acelerador	0.35	$[\mathrm{mm}]$
W_e	Espessura parede extrator	0.175	$[\mathrm{mm}]$
D_f	Diâmetro exterior do extrator/acelerador	10.0	$[\mathrm{mm}]$
L	Comprimento bocal	1.00	$[\mathrm{mm}]$

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = \Phi_0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_e, \quad (5.12)$$

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = \Phi_1, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_A, \quad (5.13)$$

$$\boldsymbol{u} = 0, \qquad \phi_e = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \alpha\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_C, \quad (5.14)$$

$$\boldsymbol{u} = \left(0; \frac{4\pi}{D_i^2} Q_i\right), \quad \alpha = 1, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[p, \rho_e, \phi_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_i, \quad (5.15)$$

$$p = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{n}}\left[\boldsymbol{u}, \alpha, \phi_e, \rho_e\right] = 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \{\Gamma_o, \Gamma_f\}. \quad (5.16)$$

5.2.2 Efeito da grelha de aceleração

Com o modelo CFD EHD validado, adicionamos agora a placa secundária de aceleração e testamos esta abordagem. Como mencionado anteriormente, e para estudar esse efeito, fixamos a região de extração. Isto significa que a diferença de potencial elétrico $\Phi_0 - \Phi_1$ tem de ser igual à condição validada de 4 kV e o caudal de entrada de 5 $\mathrm{nL\,s^{-1}}$. O domínio em estudo tem duas secções, a secção *extração* e a secção *aceleração*. A extração é $\forall z \in [0, H_1]$ e a aceleração $\forall (z + H_1) \in [0, H_2]$.

Analisemos o resultado para o campo elétrico quando se aplica uma diferença de potencial na grelha de aceleração, para duas distâncias diferentes entre o prato de extração e o de

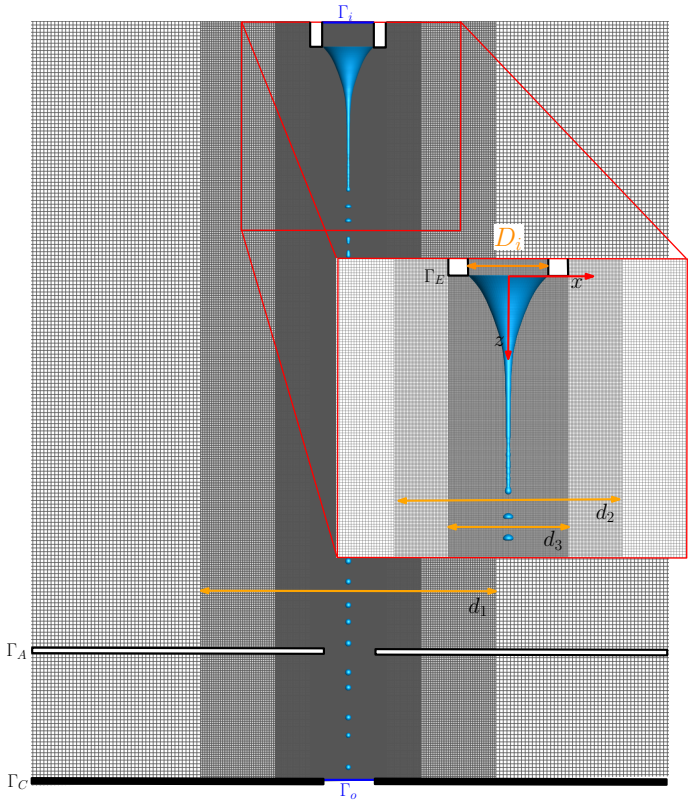


Figura 5.19: Malha computacional final sendo as distâncias (d_1, d_2, d_3) iguais a $(D_o, 2D_o, 4D_o)$.

aceleração, apresentados na Figura 5.20. Nesta comparação a relação de Phi_1/H_2 tem de ser igual.

A Figura 5.21 apresenta a distribuição de velocidades de todas as gotículas que passam por cada secção, onde a distribuição a vermelho corresponde à extração e a azul à aceleração. A partir dos resultados observa-se, de facto, a aceleração das gotículas devido ao aumento do potencial elétrico na região de aceleração. Note-se que o potencial elétrico na secção de aceleração é Φ_1, que pode assumir valores de 0, 1 e 2 kV. Temos de ter cuidado para não exceder a tensão de rotura do ar e, por isso, não efetuamos ensaios para diferenças de potencial superiores a $3\ \mathrm{kV\ mm^{-1}}$. Um aumento de 1 kV mostrou um aumento de 3,20 %/ kV e um aumento de 2,67 %/ kV. Vale a pena notar uma diminuição da $\sum$ máxima para as gotículas na região de aceleração (azul) $(z + H_1) \in [0, H_2]$, na Figura 5.21. Isto explica-se simplesmente pela maior velocidade das gotículas, devido ao aumento do campo de aceleração, e como o cálculo da nossa velocidade de gotículas é feito com instantes com a mesma taxa de captura, capturamos menos gotículas dentro do mesmo intervalo de tempo.

As leis de escala definem um diâmetro mínimo de gota que usamos como diâmetro de referência. Este diâmetro d_0 é dado por [7],

$$d_0 = \left[\gamma \varepsilon_0^2 \rho^{-1} \sigma^{-2}\right]^{1/3}, \quad (5.17)$$

Isto é agora utilizado para normalizar o campo elétrico e comparar o efeito do potencial

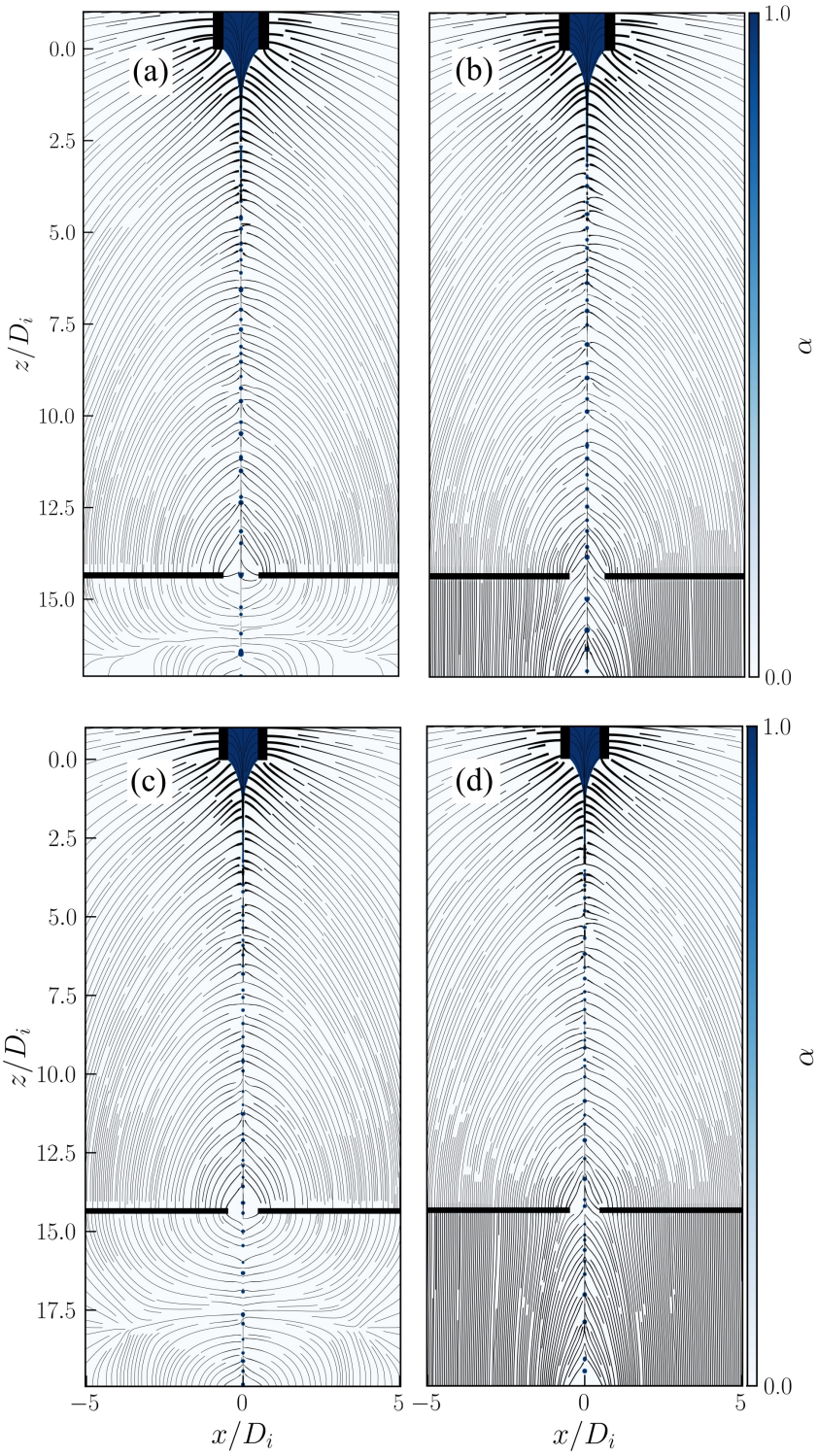


Figura 5.20: Visualização das linhas de corrente do campo elétrico para os casos de teste com a combinação de potencial elétrico dado por: Φ_0, Φ_1(a) $4-0$ (a) $5-1$ (a) $4-0$ e (c) $6-2\,\mathrm{kV}$. A espessura das linhas de corrente representadas é diretamente proporcional ao módulo do campo elétrico. Resultados para um caudal de entrada de $5\,\mathrm{nL\,s^{-1}}$.

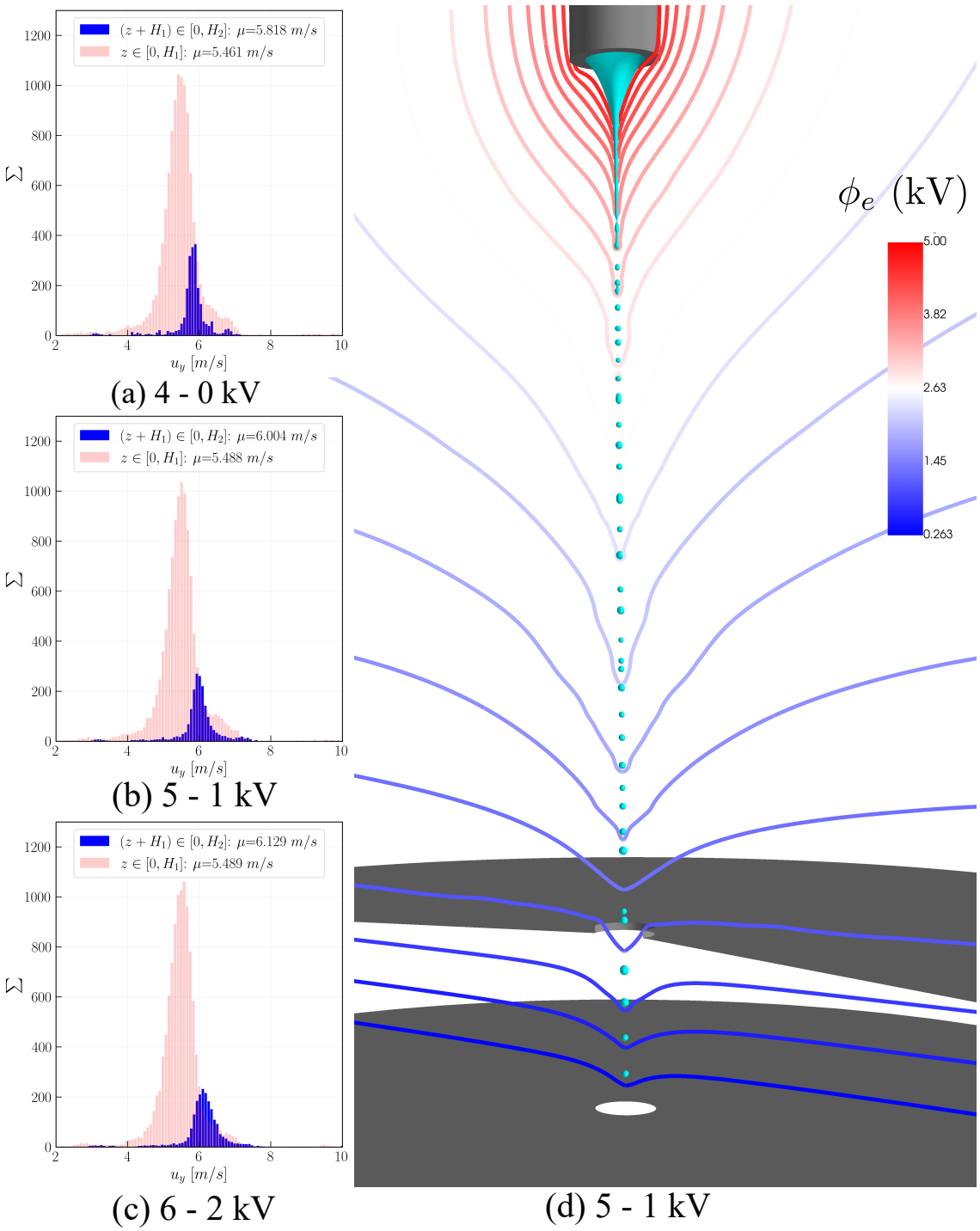
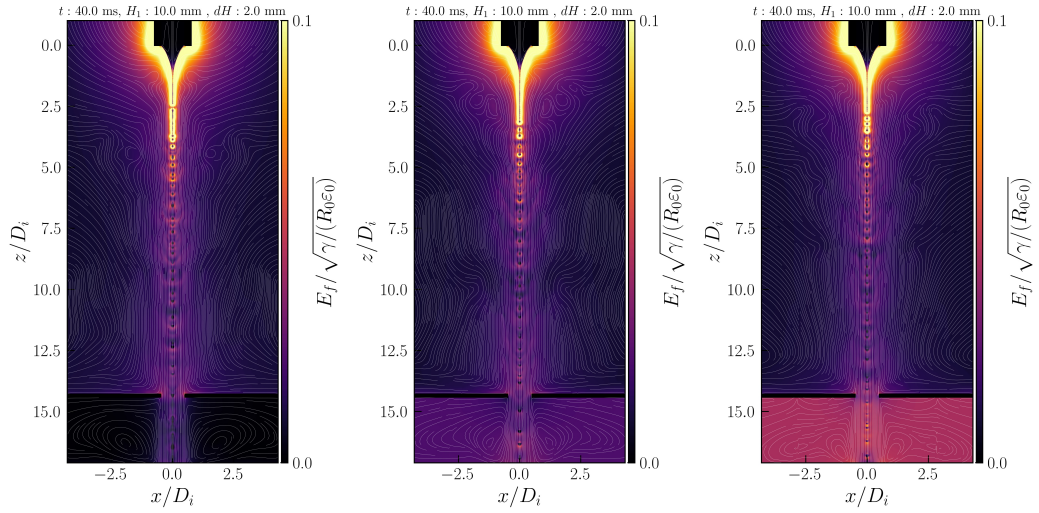


Figura 5.21: (a)-(c) Comparativo entre a velocidade das gotículas para diferentes potenciais elétricos, designados por Φ_0, Φ_1. (d) Reconstrução da interface tridimensional com as isolinhas do potencial elétrico Resultados para um caudal de entrada de 5 $\mathrm{nL\,s^{-1}}$.



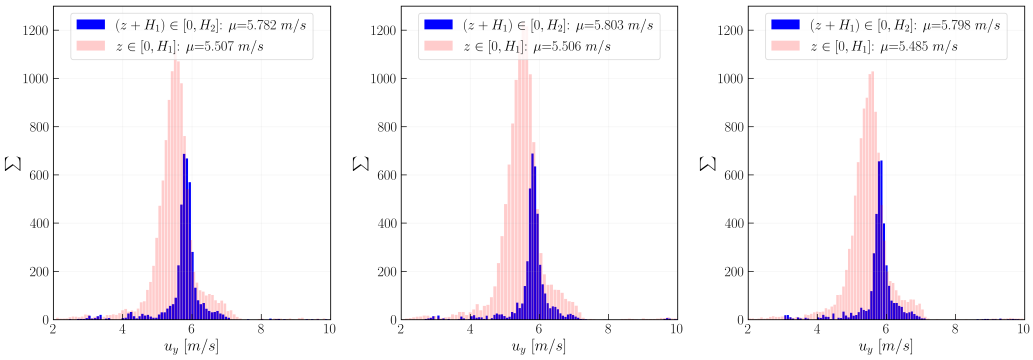
(a) $4 - 0$ kV (b) $5 - 1$ kV (c) $6 - 2$ kV

Figura 5.22: Comparação entre o campo elétrico e as linhas de corrente de velocidade geradas para diferentes condições de funcionamento, identificadas como Φ_0, Φ_1. Resultados para um caudal de entrada de 5 $\mathrm{nL\,s^{-1}}$.

elétrico para os casos de teste anteriores. Portanto normalizamos o campo elétrico por $\sqrt{\gamma/(R_0\varepsilon_0)}$. Esta normalização é de interesse para determinar onde a força do campo elétrico se acumula. A Figura5.22 apresenta o campo elétrico normalizado para os mesmos três casos de teste anteriores. Os resultados são mostrados para um H_2 de 2 mm e para o passo de tempo instantâneo final de 40 ms. Podemos observar que o jato cónico mantém aproximadamente o mesmo comprimento de transição, e o jato divide-se em gotículas a uma distância de aproximadamente $\approx 2{,}5D_i$ da ponta do bocal. Além disso, embora a região de extração tenha o mesmo potencial elétrico para todos os casos, vemos que o campo elétrico gerado pela secção de aceleração influencia esta região superior, reduzindo a taxa de acumulação de força elétrica nos bordos da placa de extração.

Como o objetivo é ter um modelo generativo capaz de fazer previsões em condições de microgravidade, e onde não há uma direção específica de atuação da aceleração gravitacional, os nossos modelos têm de ser capazes de prever as distribuições distintas para diferentes acelerações. A Figura 5.23 mostra o histograma de distribuição da velocidade da gota para diferentes condições de aceleração gravitacional, nomeadamente $\boldsymbol{g} \in \{-1, 0, 1\}G$ que corresponde a uma força mássica $\boldsymbol{g} \in \{-9.81, 0.00, 9.81\}\ \mathrm{m\,s^{-2}}$. Alteramos a aceleração gravitacional e, em seguida, alimentamos a aprendizagem do modelo ML para os efeitos da gravidade na quebra e aceleração do jato.

Como podemos observar, o efeito é muito pequeno, embora não negligenciável. A orientação do extrator coloidal influencia principalmente a forma da distribuição e não o valor médio da velocidade das gotas. Isto reforça o facto de que o modelo substituto precisa de se concentrar, para além do valor médio, na distribuição que contém mais informação, por exemplo, o desvio médio padrão. O histograma mostra que para a microgravidade, onde a aceleração é de $0G$, a frequência da média é maior.



(a) $-1G$ (b) $0G$ (c) $1G$

Figura 5.23: Comparação da velocidade da gota nas duas regiões de extração e aceleração, para diferentes condições de aceleração gravitacional. Resultados para um caudal de entrada de 5 $\mathrm{nL\,s^{-1}}$.

5.2.3 Métodos Machine Learning para otimização

Para este estudo, é utilizada uma série de diferentes modelos de aprendizagem profunda para conduzir ao processo de otimização. Estes modelos têm em conta a não-linearidade associada à aerodinâmica e reduzem o custo computacional global de uma otimização multiobjetivo em relação a uma abordagem CFD *in-the-loop* completa. Passamos a descrever em pormenor a metodologia do método de aprendizagem, sendo o fluxograma mostrado na Figura 5.24. Este estudo tem também como objetivo fornecer uma metodologia para calibrar os hiperparâmetros (*batch size*, *number os epochs*, *learning rate*, etc.) que se demonstrou terem uma grande influência na precisão das previsões.
Os passos para o treino dos nossos modelos de *Machine Learning* a partir da base de dados CFD são os seguintes.

(a) Definir as condições de funcionamento:

- Parâmetros fixos $\{D_i; D_o; D_f; L\}$
- Parâmetros variáveis $\{H_1; H_2; \Phi_0; \Phi_1; Q_i\}$

(b) Utilizar o modelo CFD para calcular a evolução temporal do jato do cone de Taylor, partindo de uma condição inicial $\sum_0$.

$$\Sigma_0 : \{(x^2 < R_i^2 \wedge 0 \leq y \leq L) \Rightarrow \alpha = 1) \quad (5.18)$$
$$\vee ((x^2 + y^2 < R_i^2 \wedge y \leq 0) \Rightarrow \alpha = 1\} \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (5.19)$$

(c) Extrair o tempo de escoamento T, a densidade de carga elétrica ρ_e, as coordenadas espaciais $\boldsymbol{X}$ e a velocidade $\boldsymbol{U}$, da iso-superfície $\sum_i$ que é a superfície livre do jato líquido.

$$\Sigma_i : \{\alpha(\mathbf{x}) = 0.5\} \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (5.20)$$

(d) Usar o algoritmo DBSCAN (Density Based SCAN)[11] para separar o jato das gotas individuais.

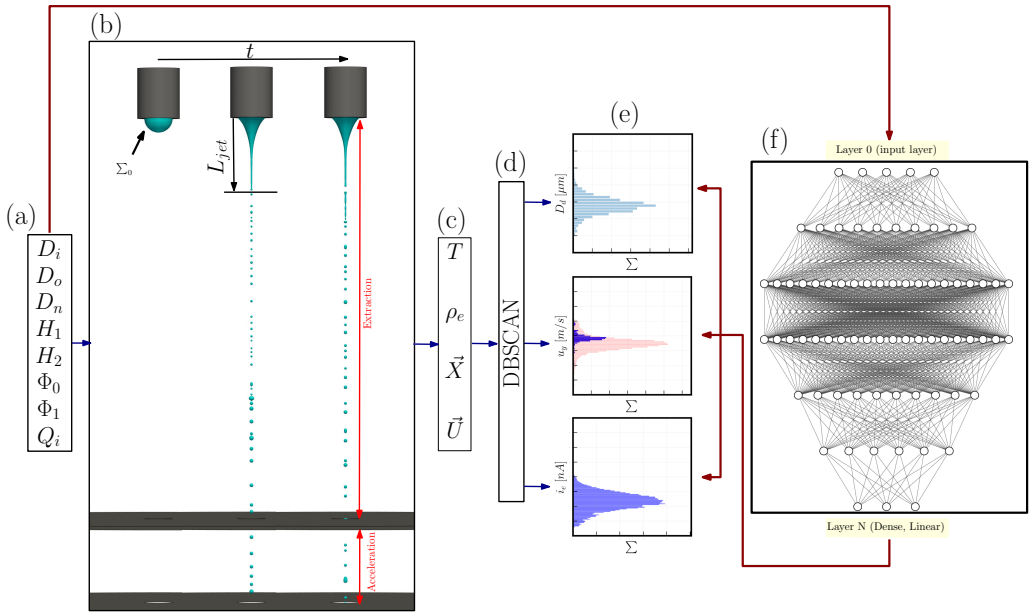


Figura 5.24: Ilustração da metodologia de trabalho da ANN adotada no presente trabalho. (setas azuis) fluxo de trabalho CFD (setas vermelhas) fluxo de trabalho ANN. Nota: DBSCAN baseado em [11].

(e) Analisar o conjunto de dados e calcular a distribuição ($H(B_j)$) do diâmetro das gotículas, a velocidade das gotículas na região de extração e aceleração e, finalmente, calcular a corrente elétrica com base no transporte de carga elétrica.

$$H(B_j) = |d_i \in D : a_j \leq d_i < a_{j+1}| \quad (5.21)$$

(f) Treinar o modelo ML para correlacionar os parâmetros da variável com as distribuições calculadas.

(1) Normalização dos campos para garantir que os valores em todos os conjuntos de dados são comparáveis (normalização máximo/mínimo).

(2) Dividir o conjunto de dados em conjuntos de treino e validação, com uma proporção de cerca de 80/20.

(3) Treinar e Avaliar o modelo nos conjuntos de treino e validação, ajustando os hiperparâmetros conforme necessário para melhorar o desempenho, utilizando uma arquitetura escolhida.

5.2.3.1 Pré-processamento da base de dados CFD

A base de dados CFD é um conjunto bruto de iso-superfícies temporais, pelo que é efetuado um pré-processamento para extrair o jato e as gotículas. Isto é feito com um *script* automático após a simulação CFD. Isto permite que a base de dados possa ser arbitrária. O algoritmo aplicado é o denominado DBSCAN (density-based spatial clustering of applications with noise) [11] na superfície iso do campo da fração de fase para isolar e analisar as gotículas de um jato em cone de Taylor, como se pode ver na Figura 5.24. Ao utilizar o DBSCAN na isosuperfície do campo α, pudemos segmentar com precisão as gotículas

da fase contínua do escoamento, mesmo quando estão muito próximas. Dado um conjunto de pontos de dados $x_1, x_2, ..., x_n$, que constituem a isosuperfície da superfície livre do líquido, o DBSCAN agrupa os pontos com base na sua densidade.

5.2.3.2 Arquitetura dos modelos ML

O nosso método de Machine Learning (ML) baseia-se em redes neuronais artificiais (ANN), mais especificamente numa ANN de *feed-forward*. Neste tipo de ANN o sinal é passado estritamente da camada de entrada para a camada de saída, ao contrário de uma ANN recorrente em que são permitidos *loops* de realimentação entre neurónios [169]. Para a primeira arquitetura utilizamos a classe de ANN de *feed-forward*. Neste contexto são testadas várias arquiteturas de rede, com a primeira camada a servir de entrada e a última camada a servir de saída (uma arquitetura é considerada diferente se o número de camadas/número de neurónios for variado, ver Figure 5.24).
A unidade básica de uma ANN é um neurónio que recebe inputs, efetua cálculos sobre eles e produz outputs [170]. O cálculo efetuado por um neurónio é normalmente uma soma ponderada das suas entradas seguida de uma função de ativação. Cada neurónio de uma ANN recebe inputs de outros neurónios ou de fontes externas e produz um output baseado numa soma ponderada de inputs modificada por uma função de ativação não linear. As funções de ativação introduzem a não linearidade no modelo, permitindo-lhe aprender padrões e relações complexas entre os dados. A saída de cada neurónio é passada como entrada para a camada seguinte de neurónios até ser produzida a saída final. Este processo é designado de propagação para a frente e é assim que o modelo faz previsões com base nos dados de entrada [171]. Considerando que x_j é o j-ésimo neurónio de entrada, w_{ij} o peso que liga o neurónio de entrada ao i-ésimo neurónio de saída, é ainda usado um termo de polarização b_i e f é a função de ativação, que no nosso caso é RELU nas camadas ocultas e linear na camada de saída, temos então que a saída y_i é dada como

$$y_i = f\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij} \cdot x_j + b_i\right). \quad (5.22)$$

Os pesos e as polarizações dos neurónios são aprendidos através de um processo chamado retropropagação. A retropropagação ajusta os pesos e as polarizações com base na diferença entre a saída prevista e a saída real. Este processo é repetido vezes sem conta no conjunto de dados de treino até que as previsões do modelo sejam suficientemente exatas nos novos dados. Os algoritmos de retropropagação minimizam a função de perda utilizando algoritmos de otimização comuns, como uma descida do gradiente estocástica ou o otimizador ADAM [172].
Uma segunda classe de ML é utilizada para testar a melhor arquitetura. Esta segunda classe denomina-se por Rede Neuronal Convolucional (CNN), para esta aplicação específica é uma rede unidimensional (1D) [173]. As redes neuronais convolucionais são uma classe de redes neuronais de tipo *feed-forward*. São constituídas por várias fases convo-

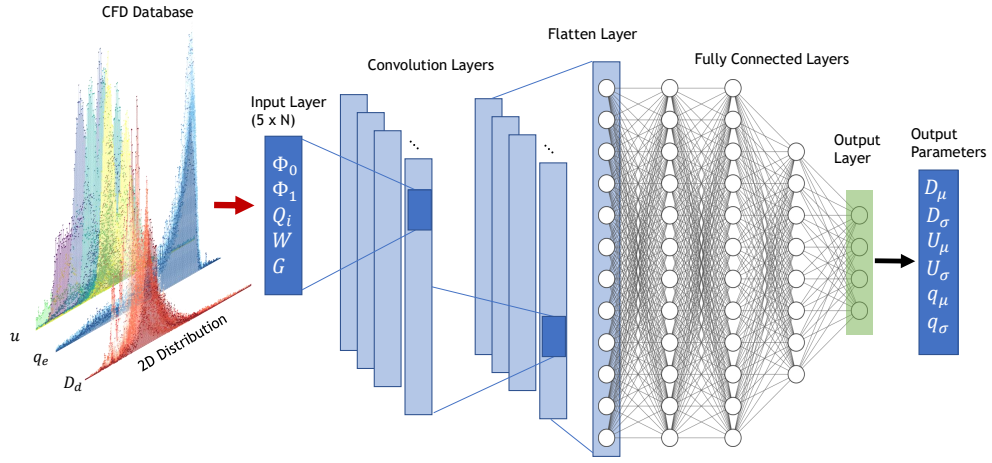


Figura 5.25: Ilustração metodológica da rede neuronal convolucional profunda unidimensional (1D CNN)

Tabela 5.3: Detalhes da arquitetura do modelo $1D-CNN$ aqui proposto: $CNN1(L1-L6)$; $CNN2(L1-L7)$ e $CNN3(L1-L8)$.

Camada	Tipo	Dimensão de saída	Tamanho do Kernel de convolução
1	Input	5x1	1
2	1D Convolution	4x8	2
3	1D Convolution	3x16	2
4	1D Convolution	2x32	2
5	Fully connected	254	N/A
6	Fully connected	128	N/A
7	Fully connected	64	N/A
8	Fully connected	32	N/A
9	Output	8	N/A

lucionais que efetuam a extração de características e uma única fase de saída que combina as características de alto nível extraídas para prever a saída desejada. A diferença entre as camadas convolucionais e as camadas totalmente ligadas da ANN é que cada neurónio numa camada convolucional está ligado apenas a uma região local na entrada e são utilizados os mesmos pesos e polarizações para cada região local [174], portanto,

$$y[i] = \sum_{j=0}^{m-1} x[i+j] \cdot k[j], \quad (5.23)$$

onde m é o tamanho do *kernel* da convolução (retângulo azul escuro) da Figura 5.25. Este tipo de arquitetura CNN1D é mostrado na Figura 5.25.

Tanto para a ANN como para a CNN 1D, testámos vários hiperparâmetros e arquiteturas de modelos para obter a arquitetura otimizada para o nosso conjunto de dados. As arquiteturas testadas são descritas na Tabela 5.3. Foram testadas três arquiteturas: CNN1, CNN2 e CNN3. .

5.2.3.3 Processo de treino e estimativa da confiança

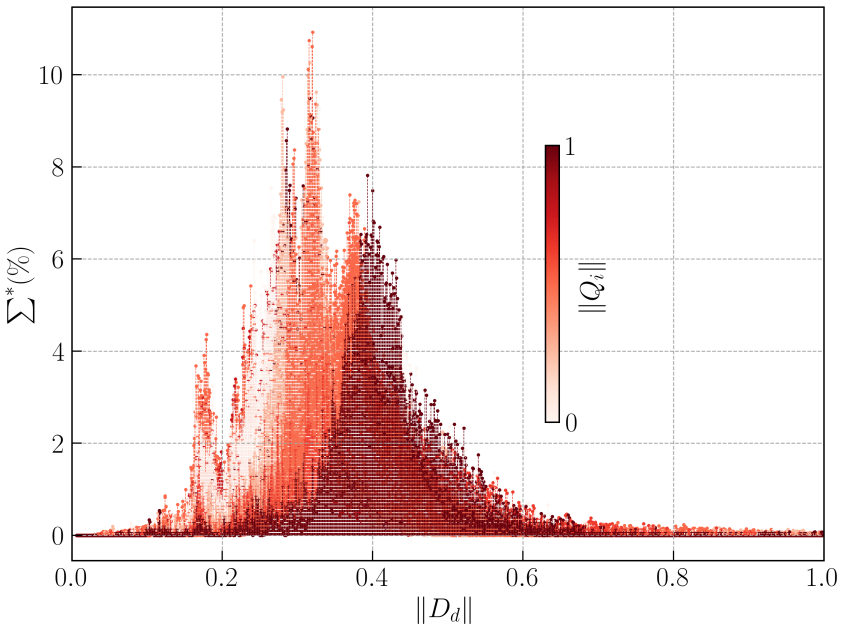
Foram testadas 40 condições de trabalho diferentes, em que o caudal de entrada foi alterado na gama de $Q_i \in [1{,}53, 7{,}00]\ \mathrm{nL\,s^{-1}}$, a diferença do potencial elétrico da extração $(\Phi_1 - \Phi_0) \in [2{,}40, 4.50]\ \mathrm{kV}$, o potencial elétrico da região de aceleração $\Phi_1 \in [0.00, 12.00]$ kV para distâncias de $H_2 \in \{0, 1, 2, 4\}\ \mathrm{mm}$ (respeitando sempre o máximo de $3\ \mathrm{kV\,mm^{-1}}$). A Figura 5.26 mostra a distribuição para a base de dados completa (todos os 40 casos). Isto mostra que as distribuições são bastante diferentes para o diâmetro da gota e a carga elétrica. Por um lado, algumas das distribuições de diâmetro parecem ser puramente gaussianas; noutras, temos distribuições modais, o que se deve à formação de gotículas primárias e satélites. Por outro lado, a carga elétrica das gotículas, calculada como $q_e = \rho_e(\frac{1}{6}\pi D_d^3)$, apresenta uma distribuição enviesada. Podemos ver que o caudal de entrada afetou principalmente o diâmetro das gotículas emitidas e não a carga, o que se deve à saturação das cargas na interface das gotículas.
Isto significa que uma média simples para cada caso não é representativa do caso, pelo que o resultado do modelo ML representará a distribuição completa. Esta distribuição tem uma resolução fixa, que representa o número de pontos ao longo da distribuição. O intervalo é fixado num diâmetro de gotículas de $D_d \in [1, 150]\ \mu\mathrm{m}$ e com uma resolução na distribuição de 1024 o modelo terá uma resolução de $0{,}15\ \mu\mathrm{m}$.
Tendo a base de dados completa para este caso particular de transição de jato em cone de Taylor e aceleração de gotículas através de uma placa secundária, utilizamos esta base para treinar modelos de aprendizagem automática profunda que demonstraram ser uma ferramenta muito melhor para a otimização de problemas de controlo nestes sistemas. Para compreender melhor as ligações que existem entre os diferentes parâmetros de controlo e os de saída é calculada a intercorrelação.
A base de dados de condições de teste é inicialmente dividida num conjunto de treino e validação numa proporção de 80/20. A convergência do treino do modelo de aprendizagem profunda é feita através da monitorização do erro quadrático médio (EQM) do conjunto de treino e da reconstrução do conjunto de validação, o que é designado por perda do modelo e é dado como

$$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \widehat{y_i}\right)^2, \quad (5.24)$$

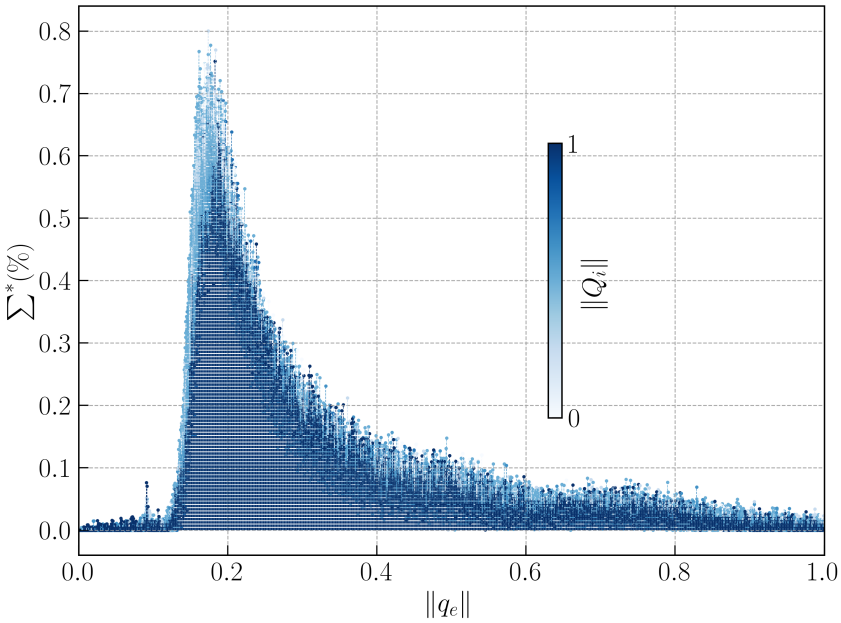
onde n é o número de amostras do conjunto de treino/validação, e y_i são os valores reais, calculados pelas simulações CFD, da amostra i-ésimo, e $\widehat{y_i}$ é o valor previsto para a mesma amostra. Após o treino aplicamos o erro médio absoluto $\mathcal{L}_{\mathrm{MAE}}$ à previsão comparando a lei do diâmetro para o jato do cone de Taylor.

$$\mathcal{L}_{\mathrm{MAE}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|y_i - \widehat{y_i}\right|, \quad (5.25)$$

Os primeiros testes foram realizados com a ANN e estudaram a forma como o tamanho

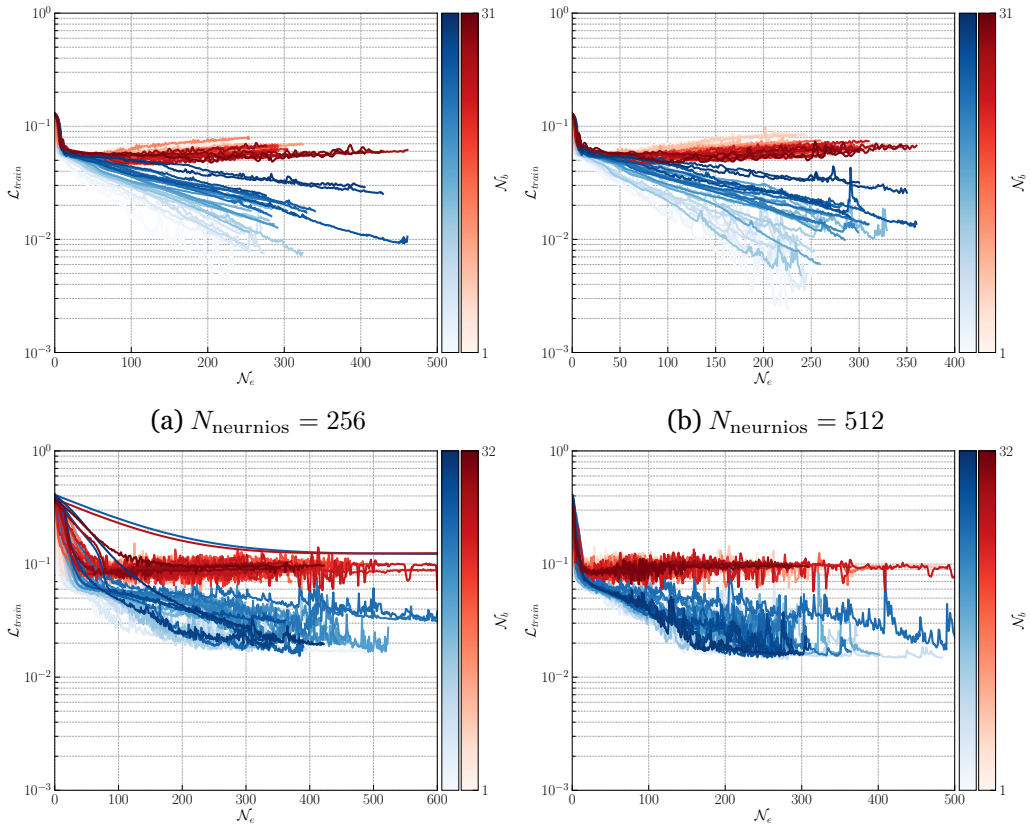


(a) Diâmetro das gotas



(b) Carga elétrica das gotas

Figura 5.26: Distribuição do (a) diâmetro da gota e (b) carga elétrica para a base de dados completa. A distribuição é normalizada pelo valor máximo.



(a) $N_{\text{neurnios}} = 256$ (b) $N_{\text{neurnios}} = 512$

(c) $N_{\text{neurnios}} = 128$ (d) $N_{\text{neurnios}} = 256$

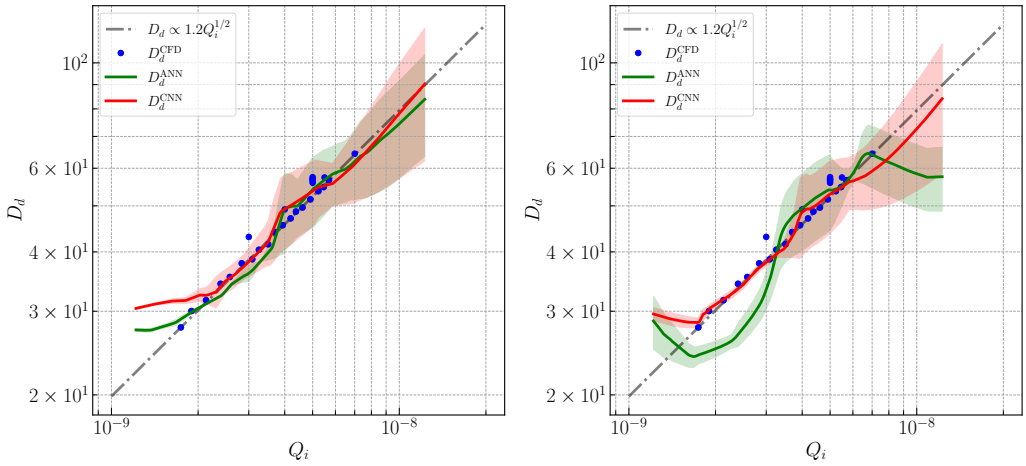
Figura 5.27: Processo de treino da (a) ANN (b) CNN com os diferentes números de neurónios para análise da perda do conjunto de treino $\mathcal{L}_{train}$ e validação $\mathcal{L}_{val}$. Para uma arquitetura com 4 camadas ocultas $N_{\text{neurnios}} = 256$

do lote afetava a estabilidade do processo de aprendizagem. A Figura 5.27a mostra o treino e validação, com mapas de cores azuis e vermelhos, respetivamente. O tamanho do lote foi testado para duas arquiteturas diferentes: uma ANN totalmente ligada com camadas de 8x16x32x64x128x256, correspondente à Figura 5.27, e uma arquitetura de 8x16x32x64x128x256x512 da Figura5.27b. Note-se que a camada de saída tem o tamanho da resolução, pelo que o número máximo de neurónios é inferior a isso.

O mesmo procedimento foi efetuado para os modelos CNN, ver as Figuras 5.27c e 5.27d. Uma grande diferença que pode ser notada é a estabilidade do modelo ML no conjunto de dados de validação. Ao contrário da ANN, em que a perda do conjunto de validação começou a aumentar, para a CNN a perda no conjunto de validação pode manter-se estável enquanto a perda do conjunto de treino diminui.

De acordo com as Figuras 5.27, o tamanho ótimo do lote é aproximadamente 20. Isto garante que a perda para os conjuntos de treino e validação diminui e estabiliza ao longo do número de épocas. A utilização de um lote completo não é recomendada se pretendermos que o modelo extrapole eficazmente, pelo que definimos o tamanho do lote para 20, o que corresponde a 80% dos dados de treino.

Usando esse tamanho de lote fixo previmos o diâmetro da gota para o intervalo do caudal de entrada $Q_i \in [10^{-9}, 10^{-7}]\ \mathrm{m^3\,s^{-1}}$. Podemos comparar as nossas previsões para este intervalo de caudal com a lei de escala do diâmetro das gotas de [124] e os dados experimen-



(a) $N_{\text{neurnios}} = 256$ (b) $N_{\text{neurnios}} = 512$

Figura 5.28: Previsão do diâmetro das gotículas médias geradas ao longo da gama de caudal de entrada aceitáveis com a ANN e o CNN para um número máximo de neurónios por camada de (a) 256 e (b) 512.

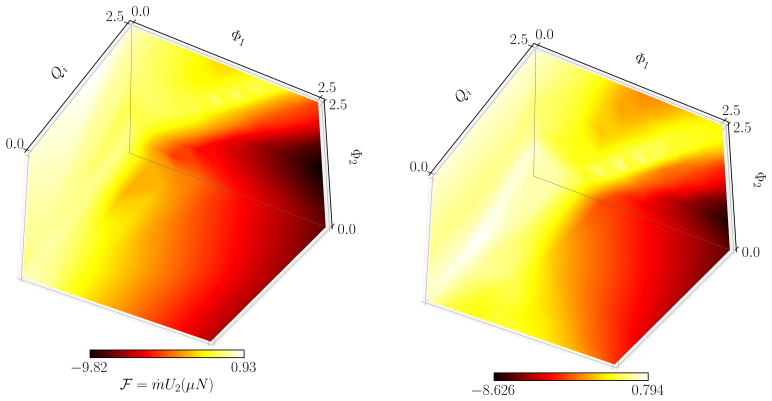
tais de [7]. Esta comparação é apresentada na Figura 5.28. Na Figura 5.28b, mostramos as previsões, utilizando os modelos ANN e CNN com um máximo de 256 neurónios. Em contraste, a Figura 5.28b mostra resultados de modelos com até 512 neurónios. Curiosamente, uma maior contagem de neurónios no modelo ML não implica necessariamente previsões mais precisas. Isto pode dever-se a um maior enviesamento introduzido durante o processo de formação.

5.2.3.4 Exploração generativa das condições de funcionamento

Com o modelo ML bem definido e mostrando que a CNN supera a ANN, usamos a CNN1 para a exploração e previsão dos espaços de atuação do jato EHD. Nesta secção de exploração as condições geométricas estão fixas e estudamos a variação do caudal de entrada Q_i, a do potencial elétrico do bocal Φ_1 e do potencial elétrico da placa extrator Φ_2. Para fazer a exploração do nosso modelo foi gerada uma matriz 15x15x15 (3375 pontos de exploração) e um espaço 3D da variação da aceleração na Figura 5.29, do diâmetro das gotas na Figura 5.30 e do impulso da Figura5.31.

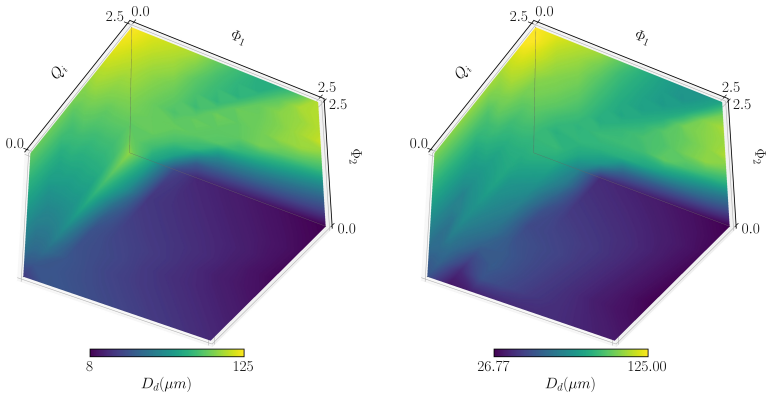
Como o objetivo deste trabalho é dispor de um modelo substituto para a modelação de um propulsor coloidal efetuamos agora as previsões da força de propulsão. Esta é calculada como $\mathcal{F} = \dot{m}U_2$, assumindo o caudal mássico $\dot{m} = 0{,}5\rho_1\pi D_d^2$. Em seguida fazemos a previsão para três condições diferentes de aceleração gravitacional, uma vez que um dos objetivos é ter um gémeo digital.

As últimas três figuras fornecem uma visão significativa das condições que efetivamente produzem impulso neste propulsor coloidal. É evidente que o caudal de entrada tem uma influência mais substancial nos parâmetros de saída do que o potencial elétrico, tal como evidenciado pela condição ∅G. Nesta condição, existem dois pontos quentes, ambos ocorrendo a um baixo potencial elétrico de extração, mas com um elevado caudal de entrada. Este fenómeno é atribuído a um aumento de $0{,}7$ no tamanho da gota correspondente a um aumento em Q_i, em vez de alterações no potencial elétrico que afetam o sistema numa or-



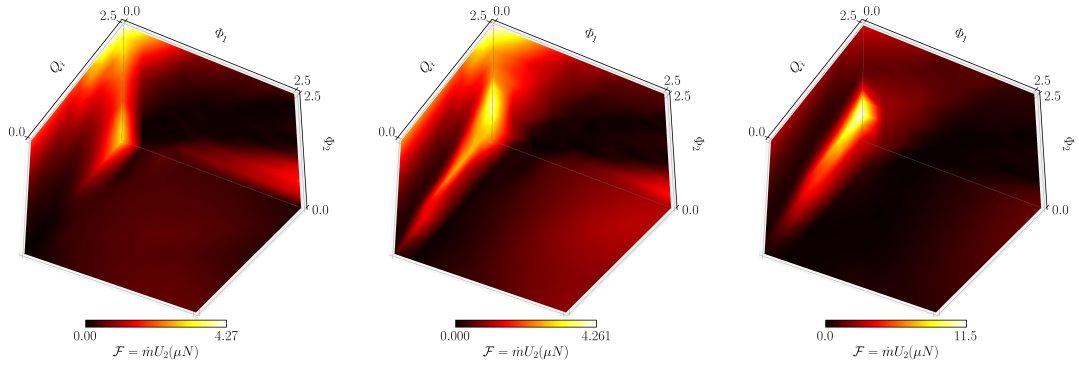
(a) $-1G$ (b) $1G$

Figura 5.29: Espaço 3D da aceleração das gotas calculada como a diferença entre a velocidade na região de aceleração e a extração $U_2 - U_1$ m s^{-1}.



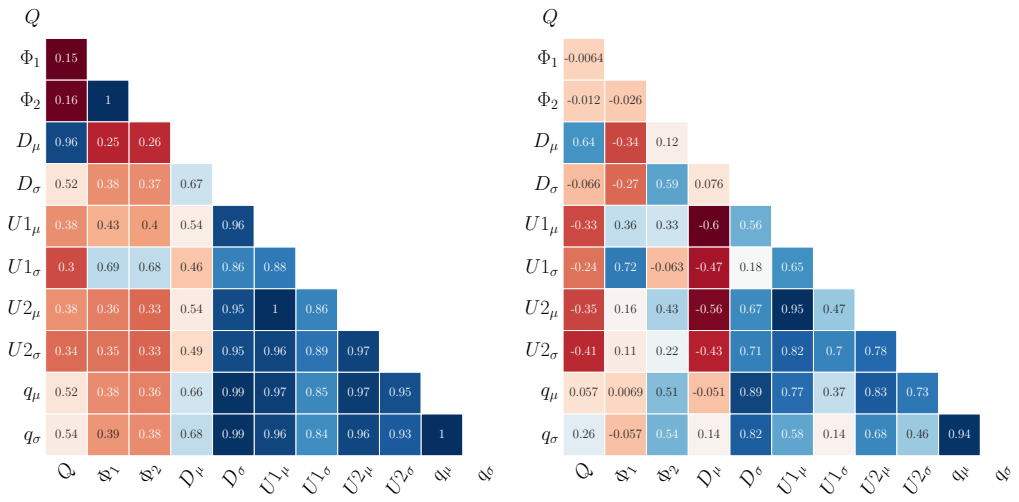
(a) $-1G$ (b) $0G$

Figura 5.30: Espaço 3D do diâmetro médio da gota para o caso de $-1G$ e $0G$.



(a) $-1G$ (b) $0G$ (c) $1G$

Figura 5.31: Previsão do impulso em diferentes condições de aceleração gravitacional.



(a) CFD (b) CNN

Figura 5.32: Mapa de calor de correlação das variáveis de entrada e saída para a base de dados CFD (a) e para o modelo ML (b) (com 1000 pontos previstos)

.

dem de cerca de 7%, como demonstrado por [115].

Para cada distribuição é calculada a média e o desvio padrão e é este valor que é comparado com as previsões agora efetuadas. Ao fazer isto transformamos a camada de saída nas condições de saída do diâmetro $\{D_\mu, D_\sigma\}$, da carga elétrica $\{q_\mu, q_\sigma\}$ e para a velocidade separamos a velocidade na região de extração (1) e a velocidade na região de aceleração (2), sendo dadas então quatro variáveis $\{U1_\mu, U1_\sigma\}$ e $\{U2_\mu, U2_\sigma\}$.

Uma vez que este problema envolve um sistema multivariável, é crucial compreender a correlação entre as variáveis de entrada e de saída. Para facilitar isso, usamos um mapa de calor de correlação para fornecer um *feedback* visual. Para os nossos mapas de calor de correlação, utilizamos o coeficiente de correlação de Pearson, neste caso entre as variáveis de entrada X e Y, que é dado como:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(X_i - \bar{X}\right)\left(Y_i - \bar{Y}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(X_i - \bar{X}\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \bar{Y}\right)^2}} \quad (5.26)$$

Este parâmetro de correlação r é visualizado utilizando um mapa de calor para proporcionar uma mais fácil visualização. Esta análise de correlação é efetuada tanto na base de dados CFD inicial como nas previsões feitas pelo modelo ML final da CNN $1D$, como se mostra na Figura 5.32. Para as previsões do modelo ML são previstos 1000 pontos. Analisando os dois mapas de correlação observamos que as correlações diferem entre o modelo CFD e o modelo ML. Esta discrepância deve-se ao facto de o modelo ML ser capaz de captar a convecção que não foi detetada pelo modelo CFD.

As correlações do modelo ML têm pontos de acesso mais estreitos, onde vemos que o caudal de entrada tem uma proporcionalidade de $0{,}64$ para o diâmetro médio das gotículas. Note-se que a correlação da lei de escala para gotículas do jato do cone de Taylor é de

$0{,}707$. O potencial elétrico de extração está relacionado por $0{,}72$ com a velocidade média da extração, e o potencial elétrico do acelerador influencia principalmente a velocidade da aceleração e a carga elétrica das gotículas.

Resumo

Foi proposto e discutido pela primeira vez, um modelo de aprendizagem automática para incorporar numa estrutura de CFD para modelação eletrodinâmica de jatos de cone de Taylor. Com esta implementação é possível obter as previsões para várias métricas de desempenho e características de jatos EHD de forma estável e precisa. Este método permite modificações e melhorias em tempo real, melhorando significativamente a eficiência e o desempenho do processo de modelação. O modelo pode reconhecer e aprender com as intrincadas interrelações que ocorrem dentro dos campos eletrodinâmicos dos jatos neste caso, utilizando o poder de computação e as capacidades de reconhecimento de padrões das técnicas de aprendizagem automática.
Embora a utilização de CNNs 1D não seja comum nestas aplicações, porque é mais aplicada no processamento de imagens, esta mostrou uma grande melhoria nas previsões do diâmetro das gotículas deste jato EHD. Isto é explicado pelas ligações locais efetuadas através da convolução com os kernels da 1DCNN. Com esta abordagem de aprendizagem profunda podemos alcançar uma precisão de $\approx$ 2 % com uma confiança de 95%, para toda a gama de $Q_i \in [10^{-9}, 10^{-8}]\ \mathrm{m^3\,s^{-1}}$. A partir deste trabalho podemos afirmar que a CNN, mesmo que unidimensional, tem um desempenho superior ao ANN em tarefas de regressão como esta.
Isto sugere que temos um gémeo digital que pode ser utilizado para prever o desempenho de um propulsor coloidal, a fim de fazer correções às condições de entrada para obter o impulso desejado. Esta capacidade é especialmente valiosa em testes de microgravidade, por exemplo, o modelo pode ajustar o potencial elétrico com base nas leituras de um acelerómetro no dispositivo onde é instalado, como um *cubesat*.

Capítulo 6

Conclusões

Esta tese apresenta uma série de estudos que validam e exploram a aplicabilidade de um modelo eletrohidrodinâmico (EHD) no contexto de escoamentos multifásicos utilizando a hipótese de meio contínuo e um modelo híbrido Volume of Fluid (VoF) - Lagrangian Particle Tracking (LPT).
O conjunto destes estudos introduz avanços significativos no entendimento do problema de cálculo de escoamentos EHD bifásicos, sublinhando a viabilidade e eficácia do modelo híbrido VoF-LPT e das estratégias de Modelos de Ordem Reduzida no estudo da dinâmica envolvida na quebra dos jatos líquidos devido à presença de campos elétricos. A integração com técnicas de aprendizagem automática abre novas possibilidades para a otimização e controlo em tempo real de aplicações como propulsores coloidais e testes em microgravidade, estabelecendo um marco importante para futuras investigações e desenvolvimentos tecnológicos.

6.1 Resumo dos principais resultados

Aprestamos em seguida os pontos principais deste trabalho.

1. Proposta e Validação dum Modelo EHD. Demonstrou-se que a implementação das equações de Maxwell e a utilização do tensor de Maxwell num modelo de hipótese de meio contínuo obtendo resultados com erros inferiores a 1% na deformação da superfície livre e que o modelo pode ser aplicado em simulações tridimensionais para estudos de instabilidades de jatos, como os jatos de cone de Taylor. O modelo mostrou-se robusto e capaz de simular escoamentos EHD não miscíveis em diversas geometrias e condições de operação.

2. Jato EHD em Modo Axissimétrico. A implementação do campo elétrico foi validada e mostrou um erro de discretização aceitável, comparando com resultados semi-analíticos, teóricos e experimentais. Os resultados da simulação estão em concordância com dados experimentais da literatura, com um desvio relativo para o diâmetro das gotículas emitidas pelo jato EHD inferior a 2%.

3. Instabilidades Tridimensionais. A simulação tridimensional completa do jato EHD ofereceu uma visão detalhada da evolução espaço-temporal do jato e das instabilidades associadas à fuga de cargas elétricas. Foi observada a formação de gotículas secundárias e satélite e discutiu-se a potencial aplicabilidade desta técnica para impressão a jato de tinta. O modelo tridimensional foi capaz de calcular o cone de Taylor com erros médios de cerca de $1{,}1\%$ na morfologia.

4. Modelo Híbrido VoF-LPT. O modelo híbrido demonstrou ser eficaz na transição de gotículas pequenas quase esféricas do domínio VoF para o LPT, reduzindo a carga computacional e preservando a precisão na caracterização do spray. A análise da distribuição de diâmetro e velocidade das gotículas suportou a aplicação para tais simulações.

5. Modelos de Ordem Reduzida (ROM). Utilizaram-se técnicas de decomposição modal (POD e DMD) para analisar o escoamento e a criação de modelos de ordem reduzida (ROMs), resultando numa redução significativa da complexidade computacional sem perda substancial de precisão, e permitindo captar as frequências predominantes e a dinâmica dos escoamentos.

6. Aplicação de Jatos EHD e Integração com *Machine Learning*. Integrou-se pela primeira vez um modelo de aprendizagem automática (ANN e CNN) em simulações CFD para otimização de propulsores coloidais e criação de um gémeo digital. A abordagem com CNN $1D$ superou a ANN, mostrando uma alta precisão nas previsões de diâmetro das gotículas.

6.2 Implicações práticas e teóricas dos resultados

As implicações práticas desta tese são significativas para várias aplicações industriais e científicas, especialmente aquelas que envolvem processos de atomização e pulverização em microescala, tais como:

- Design e Otimização de Eletrosprays. O modelo híbrido VoF-LPT pode ser utilizado para projetar e otimizar dispositivos de eletrospray, melhorando a precisão na produção de gotas e a uniformidade do spray. Isso é particularmente útil em aplicações de revestimento ou na fabricação de materiais onde o controlo do tamanho e da distribuição das gotas é crítico.

- Impressão a Jato de Tinta e Microfabricação. A capacidade do modelo de simular instabilidades tridimensionais e a formação de gotículas secundárias pode ser aplicada no desenvolvimento de técnicas de impressão a jato de tinta mais precisas, influenciando a indústria de microfabricação e eletrónicos impressos.

- Propulsão Coloidal para Satélites. As técnicas de otimização utilizando machine learning podem ser aplicadas no design de propulsores coloidais para pequenos satélites, como *CubeSats*, permitindo melhorias na eficiência e no controlo da propulsão.

- Diagnóstico e Testes em Microgravidade. A validação do modelo EHD para escoamentos em diferentes geometrias e o estudo de fenómenos em microgravidade podem ajudar a melhor compreender e prever o comportamento de líquidos em ambientes de gravidade reduzida, com implicações para a pesquisa espacial e para o desenvolvimento de tecnologias relacionadas.

- Gémeos Digitais e Controlo em Tempo Real. A integração de modelos computacionais avançados com técnicas de aprendizagem de máquina abre caminho para a criação de gémeos digitais, que podem ser usados para monitoramento em tempo real e controlo adaptativo de processos industriais.
- Análise de Redução de Complexidade Computacional. A aplicação de modelos de ordem reduzida (ROM) para a decomposição modal de escoamentos multifásicos pode facilitar a análise em tempo real de processos complexos, reduzindo custos computacionais e permitindo a implementação de soluções baseadas em *feedback*.
- Avanços na modelação e Desenvolvimento. A metodologia proposta pode acelerar o processo de pesquisa e desenvolvimento em diversas áreas, fornecendo uma ferramenta poderosa para a simulação e análise de fenómenos que eram tradicionalmente difíceis de modelar devido à sua complexidade física e computacional.

6.3 Sugestões para trabalhos futuros

1. *Eletrospinning* sem bocal

    - Desenvolvimento.

      A técnica de *eletrospinning* sem bocais pode ser explorada, utilizando um cilindro rotativo imerso num banho de líquido. Esta configuração é capaz de gerar jatos finos a partir do líquido devido à força centrífuga e ao campo elétrico aplicado, sem a necessidade de um sistema de jatos convencional. A sua implementação é mostrado na Proposta A no Apêndice D mostra este tipo de aplicação com os resultados preliminares para este caso.
    - Impacto Tecnológico.

      Este método pode ser utilizado na produção de nanofibras e microfibras, com potenciais aplicações em filtração, têxteis funcionais, suportes de cultura de tecidos e eletrónicos flexíveis. Permitiria ainda reduzir os custos e a complexidade associados aos sistemas de bocal tradicionais.

2. Multibocais de cones de Taylor (Estudo de configurações com multi-bocais paralelos)

    - Desenvolvimento.

      Investigação do efeito de dois bocais/agulhas paralelos num sistema de eletrospray, onde ambos podem ser carregados positivamente ou um positivamente e outro negativamente. O estudo examinaria a interação dos cones de Taylor e a influência da carga oposta nas trajetórias das gotas e na morfologia do spray.
    - Impacto Tecnológico.

      Esta pesquisa pode levar a novas geometrias de bocais para aplicações industriais, onde um controlo mais fino sobre a mistura e o padrão de spray é dese-

jado. As aplicações incluem impressão de precisão, revestimentos e fabricação de materiais compósito.

3. Bocais cruzados

   - Desenvolvimento.

     Análise do comportamento de escoamentos resultantes da interseção de jatos provenientes de bicos cruzados. Esta configuração pode ser utilizada para estudar a interação dinâmica entre diferentes fluidos ou mesmo entre diferentes fases do mesmo fluido.

   - Impacto Tecnológico.

     Pode resultar em técnicas inovadoras de mistura para a indústria química, farmacêutica e de alimentos, permitindo a mistura precisa de múltiplos componentes no processo de fabricação.

4. Deteção Online de perturbações ao escoamento através de modelos de classificação profunda (Machine Learning)

   - Desenvolvimento.

     Criação de um banco de dados abrangente de simulações de spray CFD sob diversas condições e utilização de algoritmos de machine learning para deteção online de perturbações no escoamento. Para cada condição de funcionamento queremos saber se existe alguma perturbação ao escoamento, nomeadamente, escoamentos cruzados indesejados, impurezas no líquido injetado, falhas no sistema de tensão aplicado ou um problema no alinhamento perpendicular do bocal com o coletor, veja-se o esquema da Proposta B no Apêndice D.

   - Impacto Tecnológico.

     Isso pode facilitar o monitoramento em tempo real e o controlo de processos de pulverização em várias indústrias, contribuindo para melhorar a eficiência, qualidade e segurança do produto. Também pode auxiliar na deteção precoce de falhas ou desvios no processo, permitindo intervenções rápidas.

5. Aceleração de simulação de eletrospray através de modelos baseados em processamento temporal de imagens (Machine Learning)

   - Desenvolvimento.

     Uso de processamento de imagem para analisar os primeiros passos temporais de simulações de eletrospray CFD, e aplicação de modelos de redes neuronais recorrentes (RNN) e Long Short-Term Memory (LSTM) para prever os estágios finais da simulação. O desenvolvimento desta proposta já foi iniciado e apresentado no trabalho de M. Pendar **S. Cândido** e J. C. Páscoa, “Optimization of painting efficiency applying unique techniques of high-voltage conductors and nitrotherm spray: Developing deep learning models using computational fluid

dynamics dataset", Physics of Fluids 35, 075119 (2023) [106]. O procedimento necessário para a sua implementação é mostrado na Proposta C no Apêndice D, na qual uma base de dados de simulações CFD de eletrospray, para várias condições de funcionamento, é usada para treinar um arquitetura especial de ANN. Esta arquitetura é especial porque irá detetar as correlações temporais de forma a conseguir prever o campo final/médio sem ter de calcular de forma bruta através do modelo CFD.

- Impacto Tecnológico.

  Tal abordagem poderia drasticamente reduzir o tempo necessário para simulações CFD, permitindo a execução de simulações complexas em tempo real ou quase real. Isso teria grandes implicações na engenharia de projeto, otimização de processos e na capacidade de simular cenários em grande escala sem o custo computacional proibitivo atualmente associado a essas tarefas.

Bibliografia

[1] D. Y. Shin, S. S. Yoo, H. E. Song, H. Tak, and D. Byun, "Electrostatic-force-assisted dispensing printing to construct high-aspect-ratio of 0.79 electrodes on a textured surface with improved adhesion and contact resistivity," *Scientific Reports*, vol. 5, 11 2015. xvii, 5

[2] K. Yan, Y. Le, H. Mengen, L. Zhongbo, and H. Zhulin, "Effect of solution miscibility on the morphology of coaxial electrospun cellulose acetate nanofibers," *Polymers*, vol. 13, 12 2021. xvii, 6

[3] Q. Xu, H. Qin, Z. Yin, J. Hua, D. W. Pack, and C. H. Wang, "Coaxial electrohydrodynamic atomization process for production of polymeric composite microspheres," *Chemical Engineering Science*, vol. 104, pp. 330–346, 12 2013. xvii, 5, 6

[4] S. Cândido and J. C. Páscoa, "Numerical analysis on the stability conditions of an electrohydrodynamic jet," *ASME 2020 International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, November 2020. xvii, 22

[5] ——, "Numerical simulation of axisymmetric electrohydrodynamic jets with volume of fluid method," *International Congress on Engineering (ICEUBI 2022), Covilhã, Portugal*, November 2022. xvii, xix, xx, 22, 81, 87

[6] ——, "Numerical simulation of electrified liquid jets using a geometrical vof method," *ASME 2021 International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, November 2021. xix, 78, 80

[7] A. M. Gañán-Calvo, J. Dávila, and A. Barrero, "Current and droplet size in the electrospraying of liquids. scaling laws," *Journal of Aerosol Science*, vol. 28, pp. 249–275, 1997. xix, xxvii, 8, 9, 11, 37, 71, 72, 73, 76, 81, 83, 91, 99, 156, 157, 158, 169

[8] L. Guo, Y. Duan, Y. A. Huang, and Z. Yin, "Experimental study of the influence of ink properties and process parameters on ejection volume in electrohydrodynamic jet printing," *Micromachines*, vol. 9, 10 2018. xxi, xxvii, 97, 98, 105, 106

[9] K. Tang and A. Gomez, "On the structure of an electrostatic spray of monodisperse droplets," *Physics of Fluids*, vol. 6, no. 7, pp. 2317–2332, 1994. xxii, xxvii, 9, 11, 121, 122, 123

[10] A. K. Arumugham-Achari, J. Grifoll, and J. Rosell-Llompart, "Two-way coupled numerical simulation of electrospray with induced gas flow," *Journal of Aerosol Science*, vol. 65, pp. 121–133, 2013. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1016/j.jaerosci.2013.07.005 xxii, 96, 121, 122

[11] M. Ester, H.-P. Kriegel, J. Sander, and X. Xu, "A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise," 1996. [Online]. Available: www.aaai.org xxiv, 162, 163

[12] J. Rosell-Llompart, J. Grifoll, and I. G. Loscertales, "Electrosprays in the cone-jet mode: From taylor cone formation to spray development," *Journal of Aerosol Science*, vol. 125, pp. 2 – 31, 2018. [Online]. Available: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850217304366 1

[13] A. Mestel, "Electrohydrodynamic stability of a slightly viscous jet," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 274, pp. 93 – 113, 09 1994. 1

[14] Y. Huang, N. Bu, Y. Duan, Y. Pan, H. Liu, Z. Yin, and Y. Xiong, "Electrohydrodynamic direct-writing," *Nanoscale*, vol. 5, pp. 12 007–12 017, 2013. 1

[15] J. U. Park, M. Hardy, S. J. Kang, K. Barton, K. Adair, D. K. Mukhopadhyay, C. Y. Lee, M. S. Strano, A. G. Alleyne, J. G. Georgiadis, P. M. Ferreira, and J. A. Rogers, "High-resolution electrohydrodynamic jet printing," *Nature Materials*, vol. 6, pp. 782–789, 2007. 1, 5, 95

[16] D. Wang, X. Zhao, Y. Lin, T. Ren, J. Liang, C. Liu, and L. Wang, "Fabrication of micro/nano-structures by electrohydrodynamic jet technique," *Frontiers of Mechanical Engineering*, vol. 12, no. 4, pp. 477–489, Dec 2017. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/s11465-017-0461-y 1

[17] B. Niu, P. Shao, Y. Luo, and P. Sun, "Recent advances of electrosprayed particles as encapsulation systems of bioactives for food application," *Food Hydrocolloids*, vol. 99, p. 105376, 2020. [Online]. Available: https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2019.105376 2

[18] F. Cruz-Mazo, M. Wiedorn, M. Herrada, S. Bajt, H. Chapman, and A. Gañán-Calvo, "Aerodynamically stabilized taylor cone jets," *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 100, p. 31101, 09 2019. 2

[19] D. Guo, X. Kang, X. Liu, and W. He, "Characteristics of liquid film on the tip surface of indium field-emission electric propulsion thrusters," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, vol. 233, pp. 908–915, 2019. 2

[20] W. Zou, H. Yu, P. Zhou, and L. Liu, "Tip-assisted electrohydrodynamic jet printing for high-resolution microdroplet deposition," *Materials and Design*, vol. 166, 3 2019. 5

[21] M. S. Onses, E. Sutanto, P. M. Ferreira, A. G. Alleyne, and J. A. Rogers, "Mechanisms, capabilities, and applications of high-resolution electrohydrodynamic jet printing," *Small*, vol. 11, no. 34, pp. 4237–4266, 2015. [Online]. Available: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/smll.201500593 5

[22] J. hun Jeong, K. Park, H. Kim, I. Park, J. Choi, and S. S. Lee, "Multiplexed electrospraying of water in cone-jet mode using a uv-embossed pyramidal micronozzle film," *Microsystems and Nanoengineering*, vol. 8, 12 2022. 5, 8

[23] Z. Esa, M. Abid, J. H. Zaini, B. Aissa, and M. M. Nauman, "Advancements and applications of electrohydrodynamic printing in modern microelectronic devices: a comprehensive review," *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, vol. 128, 9 2022. 5

[24] H. T. Yudistira, A. P. Tenggara, S. S. Oh, V. Nguyen, M. Choi, C. G. Choi, and D. Byun, "High-resolution electrohydrodynamic jet printing for the direct fabrication of 3d multilayer terahertz metamaterial of high refractive index," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, vol. 25, 4 2015. 5

[25] C. Cong, X. Li, W. Xiao, J. Li, M. Jin, S. H. Kim, and P. Zhang, "Electrohydrodynamic printing for demanding devices: A review of processing and applications," *Nanotechnology Reviews*, vol. 11, pp. 3305–3334, 1 2022. 5, 95

[26] H. Huang, G. Zhang, W. Li, Z. Yu, Z. Peng, F. Wang, X. Zhu, and H. Lan, "The theoretical model and verification of electric-field-driven jet 3d printing for large--height and conformal micro/nano-scale parts," *Virtual and Physical Prototyping*, vol. 18, 2023. 5

[27] K. S. Kwon, M. H. Jang, H. Y. Park, and H. S. Ko, "An inkjet vision measurement technique for high-frequency jetting," *Review of Scientific Instruments*, vol. 85, 2014. 5

[28] B. Im, S. K. Lee, G. Kang, J. Moon, D. Byun, and D. H. Cho, "Electrohydrodynamic jet printed silver-grid electrode for transparent raindrop energy-based triboelectric nanogenerator," *Nano Energy*, vol. 95, 5 2022. 5

[29] A. Ali, A. Zaman, E. Sayed, D. Evans, S. Morgan, C. Samwell, J. Hall, M. S. Arshad, N. Singh, O. Qutachi, M. W. Chang, and Z. Ahmad, "Electrohydrodynamic atomisation driven design and engineering of opportunistic particulate systems for applications in drug delivery, therapeutics and pharmaceutics," *Advanced Drug Delivery Reviews*, vol. 176, 9 2021. 5

[30] P. Davoodi, F. Feng, Q. Xu, W. C. Yan, Y. W. Tong, M. P. Srinivasan, V. K. Sharma, and C. H. Wang, "Coaxial electrohydrodynamic atomization: Microparticles for drug delivery applications," *Journal of Controlled Release*, vol. 205, pp. 70–82, 1 2015. 5

[31] Y. H. Lee, M. Y. Bai, and D. R. Chen, "Multidrug encapsulation by coaxial tri-capillary electrospray," *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, vol. 82, pp. 104–110, 1 2011. 5

[32] H. Liang, J. He, J. Chang, B. Zhang, and D. Li, "Coaxial nozzle-assisted electrohydrodynamic printing for microscale 3d cell-laden constructs," *International Journal of Bioprinting*, vol. 4, 2018. 5

[33] Y. Xia and D. W. Pack, “Pulsatile protein release from monodisperse liquid-core microcapsules of controllable shell thickness,” *Pharmaceutical Research*, vol. 31, pp. 3201–3210, 2014. 5

[34] ——, “Uniform biodegradable microparticle systems for controlled release,” *Chemical Engineering Science*, vol. 125, pp. 129–143, 3 2015. 5

[35] G. V. Research, “3d printing market size, share & trends analysis report by component (hardware, software, services), by printer type, by technology, by software, by application, by vertical, by region, and segment forecasts, 2022-2030,” Grand View Research, Tech. Rep., 2022. 7

[36] G. Taylor, “Disintegration of water drops in an electric field,” 1964. [Online]. Available: http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/royprsa/280/1382/383.full.pdf 7, 19

[37] C. G. Reyes and J. P. Lagerwall, “Disruption of electrospinning due to water condensation into the taylor cone,” *ACS Applied Materials and Interfaces*, vol. 12, pp. 26 566–26 576, 6 2020. 8

[38] A. K. Arumugham-Achari, J. Grifoll, and J. Rosell-Llompart, “Two-way coupled numerical simulation of electrospray with induced gas flow,” *Journal of Aerosol Science*, vol. 65, pp. 121–133, 2013. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1016/j.jaerosci.2013.07.005 9, 12, 60, 61

[39] A. S. Ismail, J. Yao, H. H. Xia, and J. P. Stark, “Breakup Length of Electrified Liquid Jets: Scaling Laws and Applications,” *Physical Review Applied*, vol. 10, no. 6, p. 1, 2018. [Online]. Available: https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.10.064010 9, 11

[40] H. H. Xia, A. Ismail, J. Yao, and J. P. Stark, “Scaling laws for transition from varicose to whipping instabilities in electrohydrodynamic jetting,” *Physical Review Applied*, vol. 12, p. 1, 2019. [Online]. Available: https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.12.014031 9, 11, 36, 99, 108

[41] Z. Wang, Q. Wang, B. Li, Y. Zhang, J. Wang, and J. Tu, “An experimental investigation on cone-jet mode in electrohydrodynamic (EHD) atomization,” *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 114, no. January, 2020. 9, 11

[42] Z. Wang, Y. Tian, C. Zhang, Y. Wang, and W. Deng, “Massively multiplexed electrohydrodynamic tip streaming from a thin disc,” *Physical Review Letters*, vol. 126, 2 2021. 9, 11, 96

[43] R. P. Hartman, D. J. Brunner, D. M. Camelot, J. C. Marijnissen, and B. Scarlett, “Jet break-up in electrohydrodynamic atomization in the cone-jet mode,” *Journal of Aerosol Science*, vol. 31, no. 1, pp. 65–95, 2000. 11

[44] M. Rubio, S. H. Sadek, A. M. Gañán-Calvo, and J. M. Montanero, "Diameter and charge of the first droplet emitted in electrospray," *Physics of Fluids*, vol. 33, no. 3, 2021. 11, 64

[45] M. R. Morad, A. Rajabi, M. Razavi, and S. R. Pejman Sereshkeh, "A Very Stable High Throughput Taylor Cone-jet in Electrohydrodynamics," *Scientific Reports*, vol. 6, no. August, pp. 1–10, 2016. 11

[46] G. Tomar, D. Gerlach, G. Biswas, N. Alleborn, A. Sharma, F. Durst, S. W. Welch, and A. Delgado, "Two-phase electrohydrodynamic simulations using a volume-of-fluid approach," *Journal of Computational Physics*, vol. 227, pp. 1267–1285, 2007. 10, 33, 77, 96, 119, 201

[47] J. M. López-Herrera, S. Popinet, and M. A. Herrada, "A charge-conservative approach for simulating electrohydrodynamic two-phase flows using volume-of-fluid," *Journal of Computational Physics*, vol. 230, pp. 1939–1955, 2011. 10

[48] H. Dastourani, M. R. Jahannama, and A. Eslami-Majd, "A physical insight into electrospray process in cone-jet mode: Role of operating parameters," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 70, pp. 315–335, 2018. [Online]. Available: https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2018.02.012 10, 14, 73, 86, 96, 119, 156

[49] P. Chen, Q. Zhou, G. Chen, Y. Wang, and J. Lv, "Numerical simulation and experimental research of electrospun polyacrylonitrile taylor cone based on multiphysics coupling," *E-Polymers*, vol. 23, 1 2023. 10

[50] J. Hua, L. K. Lim, and C. H. Wang, "Numerical simulation of deformation/motion of a drop suspended in viscous liquids under influence of steady electric fields," *Physics of Fluids*, vol. 20, 2008. 10

[51] K. Misra and M. Gamero-Castaño, "Leaky-dielectric phase field model for the axisymmetric breakup of an electrified jet," *Phys. Rev. Fluids*, vol. 7, p. 064004, Jun 2022. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.7.064004 10, 88

[52] C. L. Lu, K. Luo, P. C. Zhou, and H. L. Yi, "Lattice boltzmann analysis for electro-thermo-convection with a melting boundary in horizontal concentric annuli," *Physics of Fluids*, vol. 33, 4 2021. 12

[53] J. Zhang and D. Y. Kwok, "A 2D lattice Boltzmann study on electrohydrodynamic drop deformation with the leaky dielectric theory," *Journal of Computational Physics*, vol. 206, no. 1, pp. 150–161, 2005. 12

[54] Y. Li, Z. Wang, B. Li, J. Tian, and K. Yu, "Molecular dynamics simulation of the cone-jet electrospray: Role of surfactants," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 214, 11 2023. 12

[55] Y. Cui, N. Wang, and H. Liu, "Numerical study of droplet dynamics in a steady electric field using a hybrid lattice boltzmann and finite volume method," *Physics of Fluids*, vol. 31, 2 2019. 12

[56] Q. Nie, Q. Ma, W. Yang, X. Pan, Z. Liu, H. Fang, and Z. Yin, "Designing working diagrams for electrohydrodynamic printing," *Chemical Engineering Science*, vol. 240, 8 2021. 12

[57] M. N. Sahlan and H. Afshari, "Lucas polynomials based spectral methods for solving the fractional order electrohydrodynamics flow model," *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 107, 4 2022. 12

[58] M. Firouznia, S. H. Bryngelson, and D. Saintillan, "A spectral boundary integral method for simulating electrohydrodynamic flows in viscous drops," *Journal of Computational Physics*, vol. 489, 9 2023. 12

[59] J. Grifoll and J. Rosell-Llompart, "Continuous droplets' charge method for the lagrangian simulation of electrostatic sprays," *Journal of Electrostatics*, vol. 72, pp. 357–364, 2014. 12

[60] M. R. Pendar and J. C. Páscoa, "Atomization and spray characteristics around an erbs using various operational models and conditions: numerical investigation," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 161, 11 2020. 12

[61] ——, "Numerical analysis of charged droplets size distribution in the electrostatic coating process: Effect of different operational conditions," *Physics of Fluids*, vol. 33, 3 2021. 12, 96

[62] N. Nuwal, V. A. Azevedo, M. R. Klosterman, S. Budaraju, D. A. Levin, and J. L. Rovey, "Multiscale modeling of fragmentation in an electrospray plume," *Journal of Applied Physics*, vol. 130, 11 2021. 12

[63] H. Lei, L. Z. Wang, and Z. N. Wu, "Ehd turbulent flow and monte-carlo simulation for particle charging and tracing in a wire-plate electrostatic precipitator," *Journal of Electrostatics*, vol. 66, pp. 130–141, 3 2008. 12

[64] Y. Zhang and L. Yang, "A novel dynamic predictive method of water inrush from coal floor based on gated recurrent unit model," *Natural Hazards*, vol. 105, pp. 2027–2043, 1 2021. 12

[65] L. Hu, C. Fuzhen, W. Ping, W. Fengshan, and Q. Hongfu, "Simulating electrohydrodynamics with smoothed particle hydrodynamics based on a charge-conservative approach," *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 124, pp. 41–51, 3 2021. 12

[66] F. Yan, B. Farouk, and F. Ko, "Numerical modeling of an electrostatically driven liquid meniscus in the cone-jet mode," *Journal of Aerosol Science*, vol. 34, pp. 99–116, 2003. 13

[67] O. Lastow and W. Balachandran, "Numerical simulation of electrohydrodynamic (EHD) atomization," *Journal of Electrostatics*, vol. 64, no. 12, pp. 850–859, 2006. 13

[68] M. A. Herrada, J. M. López-Herrera, A. M. Gañán-Calvo, E. J. Vega, J. M. Montanero, and S. Popinet, "Numerical simulation of electrospray in the cone-jet mode," *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 86, no. 2, pp. 1–8, 2012. 13

[69] W. Wei, Z. Gu, S. Wang, Y. Zhang, K. Lei, and K. Kase, "Numerical simulation of the cone-jet formation and current generation in electrostatic spray - modeling as regards space charged droplet effect," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, vol. 23, p. 015004, 11 2012. 13

[70] A. Najjaran, R. Ebrahimi, M. Rahmanpour, and A. Najjaran, "Numerical simulation of electrohydrodynamic (ehd) atomization in the cone-jet mode," *Applied Mechanics and Materials*, vol. 325 - 326, pp. 180–185, 06 2013. 13

[71] M. Rahmanpour and E. Reza, "Numerical simulation of electrohydrodynamic spray with stable taylor cone–jet," *Heat and Mass Transfer*, vol. 51, 09 2015. 13

[72] A. Sen, J. Darabi, D. Knapp, and J. Liu, "Modeling and characterization of a carbon fiber emitter for electrospray ionization," *J. Micromech. Microeng*, vol. 16, pp. 620–630, 03 2006. 14

[73] M. Rahmanpour, E. Reza, and A. Pourrajabian Shahrbabak, "Numerical simulation of two-phase electrohydrodynamic of stable taylor cone–jet using a volume-of-fluid approach," *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 39, 06 2017. 14

[74] A. Rahmat, B. Koc, and M. Yildiz, "A systematic study on numerical simulation of electrified jet printing," *Additive Manufacturing*, vol. 18, pp. 15 – 21, 2017. [Online]. Available: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S221486041630238X 14

[75] Y. Pan and L. Zeng, "Simulation and validation of droplet generation process for revealing three design constraints in electrohydrodynamic jet printing," *Micromachines*, vol. 10, 2019. 14

[76] D. A. Saville, "Electrohydrodynamics:the taylor-melcher leaky dielectric model," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 29, no. 1, pp. 27–64, 1997. 14, 201

[77] J. Eggers and E. Villermaux, "Physics of liquid jets," *Reports on Progress in Physics*, vol. 71, 3 2008. 21

[78] D. H. Reneker, A. L. Yarin, H. Fong, and S. Koombhongse, "Bending instability of electrically charged liquid jets of polymer solutions in electrospinning," 2000. 22

[79] A. L. Yarin, S. Koombhongse, and D. H. Reneker, "Taylor cone and jetting from liquid droplets in electrospinning of nanofibers," *Journal of Applied Physics*, vol. 90, pp. 4836–4846, 11 2001. 22

[80] G. Tryggvason, A. Esmaeeli, J. Lu, and S. Biswas, "Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows," *Fluid Dynamics Research*, vol. 38, pp. 660–681, 9 2006. 29

[81] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*. Pearson Education, Inc, 2012. 31

[82] I. S. Shivakumara, C. O. Ng, and M. S. Nagashree, "The onset of electrothermoconvection in a rotating brinkman porous layer," *International Journal of Engineering Science*, vol. 49, pp. 646–663, 7 2011. 33

[83] Y. Ouedraogo, E. Gjonaj, T. Weiland, H. D. Gersem, C. Steinhausen, G. Lamanna, B. Weigand, A. Preusche, A. Dreizler, and M. Schremb, "Electrohydrodynamic simulation of electrically controlled droplet generation," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 64, pp. 120–128, 2017. 33

[84] D. Lohse, "Annual review of fluid mechanics fundamental fluid dynamics challenges in inkjet printing," 2021. [Online]. Available: https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-022321- 34

[85] E. Lac and G. M. Homsy, "Axisymmetric deformation and stability of a viscous drop in a steady electric field," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 590, pp. 239–264, 2007. 36, 98, 204

[86] J. F. D. L. M. A. N. D and I. G. Loscertales, "The current emitted by highly conducting taylor cones," *J. Fluid Mech*, vol. 260, pp. 155–184, 1994. 36, 108

[87] W. J. Scheideler and C. H. Chen, "The minimum flow rate scaling of taylor cone-jets issued from a nozzle," *Applied Physics Letters*, vol. 104, 1 2014. 36

[88] A. M. Gañán-Calvo, J. M. López-Herrera, N. Rebollo-Muñoz, and J. M. Montanero, "The onset of electrospray: The universal scaling laws of the first ejection," *Scientific Reports*, vol. 6, 9 2016. 36

[89] F. J. Higuera, "Flow rate and electric current emitted by a taylor cone," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 484, pp. 303–327, 6 2003. 37, 83

[90] A. M. Gañán-Calvo, N. Rebollo-Muñoz, and J. M. Montanero, "The minimum or natural rate of flow and droplet size ejected by taylor cone-jets: Physical symmetries and scaling laws," *New Journal of Physics*, vol. 15, 3 2013. 37

[91] A. M. Gañán-Calvo and J. M. Montanero, "Revision of capillary cone-jet physics: Electrospray and flow focusing," *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 79, 2009. 37

[92] S. V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*. Taylor & Francis, 1980. 42, 66

[93] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Cham, 2019. 43, 59

[94] OpenFOAM, "The open source cfd toolbox," *OpenFOAM*, 2019. [Online]. Available: www.openfoam.com 43

[95] H. Jasak, "Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows." Ph.D. dissertation, University of London, Imperial College, 1996. 43

[96] J. R. Melcher and G. I. Taylor, "Electrohydrodynamics: A review of the role of interfacial shear stresses," *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 1, no. 1, pp. 111–146, 1969. 50

[97] V. R. Gopala and B. G. van Wachem, "Volume of fluid methods for immiscible--fluid and free-surface flows," *Chemical Engineering Journal*, vol. 141, pp. 204–221, 2008. 51

[98] S. S. Deshpande, L. Anumolu, and M. F. Trujillo, "Evaluating the performance of the two-phase flow solver interFoam," *Computational Science and Discovery*, vol. 5, no. 1, 2012. 51

[99] J. P. Boris and D. L. Boon, "Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works," 1973. 51

[100] S. T. Zalesak, "Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids," *Journal of Computacional Physics*, vol. 31, 1978. 51

[101] J. Roenby, H. Bredmose, and H. Jasak, "A computational method for sharp interface advection," *Royal Society Open Science*, vol. 3, 11 2016. 54, 55, 102

[102] J. Roenby, B. E. Larsen, H. Bredmose, and H. Jasak, "A new volume-of-fluid method in openfoam," *7th International Conference on Computational Methods in Marine Engineering, MARINE 2017*, vol. 2017-May, pp. 266–277, 2017. 54

[103] J. Brackbill, D. Kothe, and C. Zemach, "A continuum method for modeling surface tension," *Journal of Computational Physics*, vol. 100, no. 2, pp. 335 – 354, 1992. 56

[104] T. Sterling, M. Anderson, and M. Brodowicz, "Chapter 9 - parallel algorithms," in *High Performance Computing*, T. Sterling, M. Anderson, and M. Brodowicz, Eds. Boston: Morgan Kaufmann, 2018, pp. 285–311. [Online]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124201583000095 58, 59

[105] D. Rettenmaier, D. Deising, Y. Ouedraogo, E. Gjonaj, H. D. Gersem, D. Bothe, C. Tropea, and H. Marschall, "Load balanced 2d and 3d adaptive mesh refinement in openfoam," *SoftwareX*, vol. 10, 7 2019. 59

[106] M. R. Pendar, S. Cândido, and J. C. Páscoa, "Optimization of painting efficiency applying unique techniques of high-voltage conductors and nitrotherm spray: Developing deep learning models using computational fluid dynamics dataset," *Physics of Fluids*, vol. 35, 7 2023. 60, 61, 177

[107] M. R. Pendar and J. C. Páscoa, "Numerical modeling of electrostatic spray painting transfer processes in rotary bell cup for automotive painting," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 80, 12 2019. 60

[108] L. He, X. Ren, Q. Gao, X. Zhao, B. Yao, and Y. Chao, "The connected-component labeling problem: A review of state-of-the-art algorithms," *Pattern Recognition*, vol. 70, pp. 25–43, 2017. [Online]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031320317301693 61

[109] P. Lösch, K. Nikolaus, and S. Antonyuk, "Fractionating of finest particles using cross-flow separation with superimposed electric field," *Separation and Purification Technology*, vol. 257, no. October 2020, 2021. 63

[110] S. Arif, D. J. Branken, R. C. Everson, H. W. Neomagus, L. A. le Grange, and A. Arif, "CFD modeling of particle charging and collection in electrostatic precipitators," *Journal of Electrostatics*, vol. 84, pp. 10–22, 2016. 64

[111] M. Heinrich and R. Schwarze, "3D-coupling of Volume-of-Fluid and Lagrangian particle tracking for spray atomization simulation in OpenFOAM," *SoftwareX*, vol. 11, p. 100483, 2020. 64, 119

[112] J. N. Smith, R. C. Flagan, and J. L. Beauchamp, "Droplet evaporation and discharge dynamics in electrospray ionization," *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 106, no. 42, pp. 9957–9967, 2002. 64

[113] L. Konermann, "A Simple Model for the Disintegration of Highly Charged Solvent Droplets during Electrospray Ionization," *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, vol. 20, no. 3, pp. 496–506, 2009. 64

[114] R. I. Issa, A. D. Gosman, and A. P. Watkins, "The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme," *Journal of Computational Physics*, vol. 62, pp. 66–82, 1986. 66

[115] S. Cândido and J. C. Páscoa, "On modal decomposition as surrogate for charge-conservative ehd modelling of taylor cone jets," *International Journal of Engineering Science*, vol. 193, 12 2023. 71, 156, 171, 197

[116] J. Guerrero, J. Rivero, V. R. Gundabala, M. Perez-Saborid, and A. Fernandez-Nieves, "Whipping of electrified liquid jets," *Proceedings of the National Academy of*

Sciences of the United States of America, vol. 111, no. 38, pp. 13 763–13 767, 2014. 71

[117] G. Taylor, "Electrically driven jets," *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 313, no. 1515, pp. 453–475, 1969. 72

[118] N. John W. Slater. (2021) Examining spatial (grid) convergence. [Online]. Available: https://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/tutorial/spatconv.html 75

[119] A. Spitzenberger, S. Neumann, M. Heinrich, and R. Schwarze, "Particle detection in vof-simulations with openfoam," *SoftwareX*, vol. 11, 1 2020. 80

[120] J. Rosell-Llompart, J. Grifoll, and I. G. Loscertales, "Electrosprays in the cone-jet mode: From taylor cone formation to spray development," *Journal of Aerosol Science*, vol. 125, pp. 2–31, 2018. [Online]. Available: https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2018.04.008 88

[121] Z. Jiang, Y. Gan, and Y. Shi, "An improved model for prediction of the cone-jet formation in electrospray with the effect of space charge," *Journal of Aerosol Science*, vol. 139, no. January 2019, p. 105463, 2020. [Online]. Available: https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2019.105463 88, 110

[122] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, İ. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and SciPy 1.0 Contributors, "SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python," *Nature Methods*, vol. 17, pp. 261–272, 2020. 90

[123] G. I. Taylor, A. D. McEwan, and L. N. J. de Jong, "Studies in electrohydrodynamics. i. the circulation produced in a drop by an electric field," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 291, no. 1425, pp. 159–166, 1966. 94, 201, 202, 204

[124] S. Cândido and J. C. Páscoa, "Dynamics of three-dimensional electrohydrodynamic instabilities on taylor cone jets using a numerical approach," *Physics of Fluids*, vol. 35, 5 2023. 95, 131, 168

[125] M. Gamero-Castaño and M. Magnani, "Numerical simulation of electrospraying in the cone-jet mode," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 859, pp. 247–267, 2018. 95, 96, 119

[126] A. M. Gañán-Calvo, J. M. López-Herrera, M. A. Herrada, A. Ramos, and J. M. Montanero, "Review on the physics of electrospray: From electrokinetics to the opera-

ting conditions of single and coaxial taylor cone-jets, and ac electrospray," *Journal of Aerosol Science*, vol. 125, pp. 32–56, 11 2018. 95

[127] W. Wei, Z. Gu, S. Wang, Y. Zhang, K. Lei, and K. Kase, "Numerical simulation of the cone-jet formation and current generation in electrostatic spray - modeling as regards space charged droplet effect," *Journal of Micromechanics and Microengineering*, vol. 23, 2013. 96, 119

[128] Q. Yang, B. Q. Li, Z. Zhao, J. Shao, and F. Xu, "Numerical analysis of the rayleigh--taylor instability in an electric field," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 792, pp. 397–434, 3 2016. 96

[129] Q. Yang, B. Q. Li, and F. Xu, "Electrohydrodynamic rayleigh-taylor instability in leaky dielectric fluids," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 109, pp. 690–704, 2017. 96

[130] D. A. Kessler and M. Merrill, "A lagrangian-eulerian method for simulating electrospray deposition," pp. 1–10, 2019. 96, 119

[131] K. Luo, T. F. Li, J. Wu, H. L. Yi, and H. P. Tan, "Mesoscopic simulation of electrohydrodynamic effects on laminar natural convection of a dielectric liquid in a cubic cavity," *Physics of Fluids*, vol. 30, 10 2018. 96

[132] Q. Yang, B. Q. Li, and Y. Ding, "3d phase field modeling of electrohydrodynamic multiphase flows," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 57, pp. 1–9, 12 2013. 96

[133] Q. Yang, B. Q. Li, J. Shao, and Y. Ding, "A phase field numerical study of 3d bubble rising in viscous fluids under an electric field," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 78, pp. 820–829, 2014. 96

[134] M. Shen, B. Q. Li, and Q. Yang, "A 3-d phase field study of dielectric droplet impact under a horizontal electric field," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 162, 5 2023. 96

[135] S. K. Das, A. Dalal, and G. Tomar, "Electrohydrodynamic-induced interactions between droplets," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 915, 2021. 96

[136] Y. Guan, S. Wu, M. Wang, Y. Tian, W. Lai, and Y. Huang, "Numerical analysis of electrohydrodynamic jet printing under constant and step change of electric voltages," *Physics of Fluids*, vol. 34, 6 2022. 97, 98, 99, 101

[137] L. min Li, D. qing Hu, Y. cheng Liu, B. tao Wang, C. Shi, J. jie Shi, and C. Xu, "Large eddy simulation of cavitating flows with dynamic adaptive mesh refinement using openfoam," *Journal of Hydrodynamics*, vol. 32, pp. 398–409, 4 2020. 97

[138] M. P. Boruah, A. Sarker, P. R. Randive, S. Pati, and K. C. Sahu, "Tuning of regimes during two-phase flow through a cross-junction," *Physics of Fluids*, vol. 33, 12 2021. 98

[139] W. Yang, H. Duan, C. Li, and W. Deng, "Crossover of varicose and whipping instabilities in electrified microjets," *Physical Review Letters*, vol. 112, 2 2014. 99

[140] S. Yang, Z. Wang, Q. Kong, B. Li, and J. Wang, "Visualization on electrified micro-jet instability from taylor cone in electrohydrodynamic atomization," *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 44, pp. 456–465, 4 2022. 99

[141] W. van Hoeve, S. Gekle, J. H. Snoeijer, M. Versluis, M. P. Brenner, and D. Lohse, "Breakup of diminutive rayleigh jets," *Physics of Fluids*, vol. 22, 12 2010. 99

[142] Y. Pan and K. Suga, "A numerical study on the breakup process of laminar liquid jets into a gas," *Physics of Fluids*, vol. 18, 2006. 99

[143] M. Magnini, F. Municchi, I. E. Mellas, and M. Icardi, "Liquid film distribution around long gas bubbles propagating in rectangular capillaries," *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 148, 3 2022. 101

[144] L. Gamet, M. Scala, J. Roenby, H. Scheufler, and J. L. Pierson, "Validation of volume-of-fluid openfoam® isoadvector solvers using single bubble benchmarks," *Computers and Fluids*, vol. 213, 12 2020. 101

[145] E. Grustan-Gutierrez and M. Gamero-Castaño, "Microfabricated electrospray thruster array with high hydraulic resistance channels," *Journal of Propulsion and Power*, vol. 33, pp. 984–991, 2017. 108

[146] D. W. SCOTT, "On optimal and data-based histograms," *Biometrika*, vol. 66, no. 3, pp. 605–610, 12 1979. 124

[147] M. A. Mendez, M. Raiola, A. Masullo, S. Discetti, A. Ianiro, R. Theunissen, and J. M. Buchlin, "Pod-based background removal for particle image velocimetry," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 80, pp. 181–192, 1 2017. 131

[148] D. Lengani, D. Simoni, M. Ubaldi, and P. Zunino, "Pod analysis of the unsteady behavior of a laminar separation bubble," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 58, pp. 70–79, 2014. 131

[149] M. A. Mendez, A. Gosset, B. Scheid, M. Balabane, and J. M. Buchlin, "Dynamics of the jet wiping process via integral models," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 911, 2021. 131

[150] Z. Wu, D. Laurence, S. Utyuzhnikov, and I. Afgan, "Proper orthogonal decomposition and dynamic mode decomposition of jet in channel crossflow," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 344, pp. 54–68, 4 2019. 131, 135

[151] M. Arienti and M. C. Soteriou, "Time-resolved proper orthogonal decomposition of liquid jet dynamics," *Physics of Fluids*, vol. 21, no. 11, pp. 1–15, 2009. 131

[152] B. Herrmann, P. J. Baddoo, R. Semaan, S. L. Brunton, and B. J. Mckeon, "Data-driven resolvent analysis," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 918, pp. 1–19, 2021. 132

[153] S. Le Clainche, M. E. Rosti, and L. Brandt, "A data-driven model based on modal decomposition: Application to the turbulent channel flow over an anisotropic porous wall," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 939, pp. 1–45, 2022. 132, 144, 147

[154] P. J. Schmid, "Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 656, pp. 5–28, 2010. 132, 143, 144

[155] N. Demo, G. Ortali, G. Gustin, G. Rozza, and G. Lavini, "An efficient computational framework for naval shape design and optimization problems by means of data-driven reduced order modeling techniques," *Bolletino dell Unione Matematica Italiana*, vol. 14, no. 1, pp. 211–230, 2021. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/s40574-020-00263-4 132, 133

[156] V. Kitsios, L. Cordier, J. P. Bonnet, A. Ooi, and J. Soria, "On the coherent structures and stability properties of a leading-edge separated aerofoil with turbulent recirculation," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 683, pp. 395–416, 2011. 133

[157] R. Vitkovicova, Y. Yokoi, and T. Hyhlik, "Identification of structures and mechanisms in a flow field by POD analysis for input data obtained from visualization and PIV," *Experiments in Fluids*, vol. 61, no. 8, pp. 1–21, 2020. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/s00348-020-03005-6 133, 136

[158] K. Taira, S. L. Brunton, S. T. Dawson, C. W. Rowley, T. Colonius, B. J. McKeon, O. T. Schmidt, S. Gordeyev, V. Theofilis, and L. S. Ukeiley, "Modal analysis of fluid flows: An overview," *AIAA Journal*, vol. 55, pp. 4013–4041, 2017. 135

[159] A. Hekmati, D. Ricot, and P. Druault, "About the convergence of pod and epod modes computed from cfd simulation," *Computers and Fluids*, vol. 50, pp. 60–71, 11 2011. 136

[160] H. Gunes and U. Rist, "Proper orthogonal decomposition reconstruction of a transitional boundary layer with and without control," *Physics of Fluids*, vol. 16, pp. 2763–2784, 2004. 139

[161] S. B. Leask and V. G. McDonell, "On the Physical Interpretation of Proper Orthogonal Decomposition and Dynamic Mode Decomposition for Liquid Injection," pp. 1–26, 2019. [Online]. Available: http://arxiv.org/abs/1909.07576 139, 143, 144

[162] O. Semeraro, G. Bellani, and F. Lundell, "Analysis of time-resolved PIV measurements of a confined turbulent jet using POD and Koopman modes," *Experiments in Fluids*, vol. 53, no. 5, pp. 1203–1220, 2012. 144

[163] S. Le Clainche, J. M. Vega, and J. Soria, "Higher order dynamic mode decomposition of noisy experimental data: The flow structure of a zero-net-mass--flux jet," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 88, pp. 336–353, 2017. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2017.06.011 144, 147

[164] S. Le Clainche, D. Izbassarov, M. Rosti, L. Brandt, and O. Tammisola, “Coherent structures in the turbulent channel flow of an elastoviscoplastic fluid,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 888, 2020. 144

[165] L. Cordier, B. A. E. Majd, and J. Favier, “Calibration ofPOD reduced-order models using Tikhonov regularization,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 65, no. October 2010, pp. 236–253, 2010. 146

[166] R. Yoon and B. Osting, “A dynamical systems based framework for dimension reduction,” pp. 1–26, 2022. [Online]. Available: http://arxiv.org/abs/2204.08155 146

[167] T. C. Rebollo, S. Rubino, M. Oulghelou, and C. Allery, “Error analysis of a residual-based stabilization-motivated pod-rom for incompressible flows,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 401, 11 2022. 149

[168] L. Giulicchi, S.-F. Wu, and T. Fenal, “Attitude and orbit control systems for the lisa pathfinder mission,” *Aerospace Science and Technology*, vol. 24, no. 1, pp. 283–294, 2013, vFE-2. [Online]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S127096381100201X 155

[169] A. F. Gad and F. E. Jarmouni, “Chapter 2 - introduction to artificial neural networks (ann),” in *Introduction to Deep Learning and Neural Networks with Python™*, A. F. Gad and F. E. Jarmouni, Eds. Academic Press, 2021, pp. 15–32. [Online]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780323909334000073 164

[170] D. F. Specht, “A general regression neural network,” *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 2, no. 6, p. 568 – 576, 1991. 164

[171] A. Graves, “Generating sequences with recurrent neural networks,” 8 2013. [Online]. Available: http://arxiv.org/abs/1308.0850 164

[172] F. Tejero, D. G. MacManus, F. Sanchez-Moreno, and C. Sheaf, “Neural network--based multi-point, multi-objective optimisation for transonic applications,” *Aerospace Science and Technology*, vol. 136, 5 2023. 164

[173] S. Ren, X. Wang, L. Hao, F. Yang, J. Niu, M. Cai, Y. Shi, T. Wang, and Z. Luo, “1d-cnns model for classification of sputum deposition degree in mechanical ventilated patients based on airflow signals,” *Expert Systems with Applications*, vol. 237, p. 121621, 2024. [Online]. Available: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417423021231 164

[174] J. Hu and W. Zhang, “Flow field modeling of airfoil based on convolutional neural networks from transform domain perspective,” *Aerospace Science and Technology*, vol. 136, 5 2023. 165

[175] C. J. Roy, C. C. Nelson, T. M. Smith, and C. C. Ober, "Verification of Euler/Navier--Stokes codes using the method of manufactured solutions," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 44, no. 6, pp. 599–620, 2004. 200

[176] I. Roghair, M. Musterd, D. van den Ende, C. Kleijn, M. Kreutzer, and F. Mugele, "A numerical technique to simulate display pixels based on electrowetting," *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 19, no. 2, pp. 465–482, Aug 2015. 201

[177] J. López-Herrera, S. Popinet, and M. Herrada, "A charge-conservative approach for simulating electrohydrodynamic two-phase flows using volume-of-fluid," *J. Comput. Physics*, vol. 230, pp. 1939–1955, 03 2011. 201, 202

Apêndice A

Publicações

Este anexo apresenta a lista das publicações e manuscritos em fase de preparação, nos quais esta tese é baseada. Mostrando a contribuição especifica para o estado da arte da modelação e otimização de jatos eletrohidrodinâmicos.

A.1 Artigos em revistas internacionais com arbitragem científica

1. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Data-driven surrogate modelling of multistage Taylor cone–jet dynamics, *Physics of Fluids*, 2024. https://doi.org/10.1063/5.0205454
2. M. Pendar, **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Optimization of Painting Efficiency Applying Unique Techniques of High-voltage Conductors and Nitrotherm Spray: Developing Deep Learning Models Using Computational Fluid Dynamics Dataset, *Physics of Fluids*, 2023. https://doi.org/10.1063/5.0156571
3. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Dynamics of three-dimensional electrohydrodynamic instabilities on Taylor cone jets using a numerical approach, *Physics of Fluids*, 2023. https://doi.org/10.1063/5.0151109
4. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, On modal decomposition as surrogate for charge-conservative EHD modelling of Taylor Cone jets, *International Journal of Engineering Science*, 2023. https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2023.103947
5. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical simulations of the atomization of electrified liquid jets with a 3D coupled VoF/LPT model, *Journal of Aerosol Science* (Em preparação)

A.2 Artigos em conferências internacionais com arbitragem científica

1. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, A Three-Dimensional Numerical Investigation of Taylor Cone Jet Instabilities Using the VOF Method, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, New Orleans, LA. October 29 - November 2, 2023. DOI: 10.1115/IMECE2023-112763
2. **S. Cândido**, M. Pendar, J. C. Páscoa, Improving Efficiency of Automotive Coating and Curing Processes Through Deep Learning Algorithms and High-Fidelity CFD

Modeling, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, New Orleans, LA. October 29 - November 2, 2023. DOI: 10.1115/IMECE2023-112373

3. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical Simulation of Axisymmetric Electrohydrodynamic Jets with Volume of Fluid Method, *ICEUBI - International Congress on Engineering*, Covilhã, Portugal, November 28, 29 and 30, 2022. Paper no. 5527

4. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical Analysis of Interfacial Electrohydrodynamic Flow With Modal Decomposition, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Columbus, Ohio. 2022. https://doi.org/10.1115/IMECE2022-95100

5. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical Simulation of Electrified Liquid Jets Using a Geometrical VoF Method, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Virtual, Online. 2021. https://doi.org/10.1115/imece2021-69817

6. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical Analysis on the Stability Conditions of an Electrohydrodynamic Jet, *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, Portland, Oregon. 2020. https://doi.org/10.1115/imece2020-24101

7. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Multi-physical Modelling of Electrohydrodynamic Liquid Jets: Perspectives on Deep Learning Surrogates, *ECCOMAS CONGRESS 2024. 9th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering.*, Lisbon, Portugal. 7 - 9 June, 2023. (Submitted)

A.3 Posters científicos

1. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Numerical Investigations on Atomization of Electrohydrodynamic Jets, *Encontro UBI Ciência e Inovação 2023*, 20 a 24 de novembro de 2023, Covilhã, Portugal ⇓

2. **S. Cândido**, J. C. Páscoa, Advances on Modelling the Atomization of Electrohydrodynamic Jets, *Encontro Ciência 2023*, 5-7 July 2023, Aveiro, Portugal ⇓

Apêndice B

Validação do modelo numérico de meio contínuo

Este capítulo apresenta,

- A validação do modelo VoF EHD;
- O cálculo de casos de teste para *benchmark* da ordem de precisão da discretização das equações EHD;
- A comparação com soluções analíticas;
- A estimativa do erro associado à deformação da interface de gotas em campos elétricos.

B.1 Ordem de Precisão da Discretização[1]

As camadas planas são casos de teste quase unidimensionais com os quais pretendemos simplesmente obter a precisão do algoritmo implementado. Estes casos de teste são configurados para aceder ao erro da discretização e à ordem de precisão da solução das equações do campo elétrico.
A geometria do caso de teste está representada na Figura B.1. Um potencial elétrico fixo $\tilde{\phi}_e$ é aplicado ao domínio global entre dois elétrodos paralelos separados por H. O elétrodo superior é considerado o solo com um potencial elétrico $\phi_e = 0$. A largura da geometria é dez vezes menor do que a altura (distância entre os elétrodos) para evitar a difusão numérica na direção normal ao campo elétrico aplicado.
São testados dois tipos de sistemas de fases, de acordo com a propriedade elétrica de cada fase. Em primeiro lugar, é testado um sistema composto por dois líquidos condutores, que designaremos por caso cc, para inferir sobre a variação do campo elétrico com a condutividade. Os nossos casos de teste dizem também respeito à aplicabilidade do algoritmo numérico em fluidos que são simultaneamente condutor e dielétrico. É então realizado um teste de um sistema dielétrico-condutor, que designamos por caso dc.
Começamos por considerar um sistema cc em que a magnitude da distribuição do campo elétrico e o campo elétrico podem ser calculados analiticamente. Teoricamente, esta configuração será equivalente a uma resistência hidrodinâmica. Consideremos que o potencial elétrico é aplicado a duas resistências em série, sendo assim igual a,

$$\tilde{\phi}_{e,i} = R_T i_e \quad , \quad R_T = \frac{h_i}{\sigma}, \quad \text{(B.1)}$$

[1]Resultados apresentados em S. Cândido and J. C. Páscoa, "On modal decomposition as surrogate for charge-conservative EHD modelling of Taylor cone jets", International Journal of Engineering Science, vol. 193, 12 2023. [115]

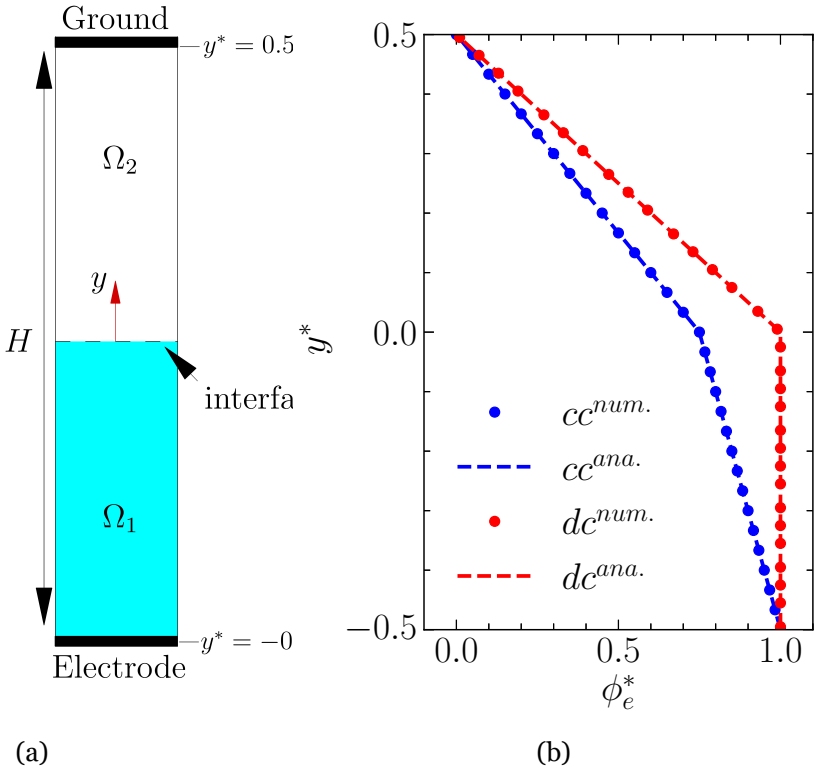


Figura B.1: Caso de validação I – (a) Esquema geométrico da configuração dos casos de teste da camada planar. A geometria tem uma largura de $H/10$. (b) Potencial elétrico através do eixo y para o caso condutor-condutor (cc) e dielétrico-condutor (dc). A condição de volume inicial é definida como $\sum_{t_0} : \{y < 0\}$.

em que R_T é a resistência elétrica total do domínio quando se considera um material homogéneo. E h_i é o comprimento do domínio do material em causa e $h_i^* = h_i/H$ a altura normalizada. O potencial elétrico total é igual à soma dos potenciais elétricos dos domínios separados. Para o domínio Ω_1 é possível escrever,

$$\phi_{e,1}(y) = \tilde{\phi}_e \left[\frac{h_2\sigma_1 + \sigma_2 y}{l_2\sigma_1 + h_1\sigma_2} \right]. \quad \text{(B.2)}$$

Como o comprimento dos subdomínios é o mesmo, $h_1^* = h_2^* = 1/2$, $H = h_1 + h_2$, e aplicando um potencial elétrico de $\phi_e^* = \phi_e/\tilde{\phi}_e = 1$ obtemos,

$$\phi_{e,1}(y) = \frac{-2y\sigma_2 + \sigma_1}{\sigma_1 + \sigma_2}. \quad \text{(B.3)}$$

Além disso, se considerarmos a razão da condutividade, R, a solução exata pode ser escrita como,

$$\phi_{e,1}^{ana.} = \frac{-2y + R}{1 + R} \quad , \quad \phi_{e,2}^{ana.} = \frac{(-2y + 1)R}{1 + R}, \quad \text{(B.4)}$$

onde $\phi_{e,i}^{\text{ana.}}$ é o potencial elétrico na posição y relativa ao domínio Ω_i. Note-se que a solução para o subdomínio Ω_2 é complementar da solução para o subdomínio Ω_1. Uma vez que para descrever os diferentes domínios das diferentes fases utilizamos a equação de estado α, estas duas soluções podem então ser prescritas numa única equação como,

$$\phi_e^{ana.} = \left[R - 2y\left(R + \alpha - R\alpha \right) \right] \frac{1}{1 + R}, \quad \text{(B.5)}$$

Como descrito anteriormente, a intensidade do campo elétrico $\boldsymbol{E}$ é o gradiente negativo do potencial elétrico escalar ϕ_e. Assim, o campo elétrico esperado pode ser calculado como,

$$E^{ana.} = 2\left(R + \alpha - R\alpha \right) \frac{1}{1 + R}. \quad \text{(B.6)}$$

De um domínio para o outro há um salto de pressão, $\Delta P = P_1 - P_2$, normalizado por $\varepsilon_2\tilde{\phi}_e^2/h^2$, que para o caso dc é igual a -2, e para o caso cc é,

$$\Delta P_{cc}^{ana.} = -\frac{2(R^2 - Q)}{(1 + R)^2} \quad \text{(B.7)}$$

Esta solução analítica é utilizada para avaliar a precisão global da discretização das equações do campo elétrico. Uma vez que a definição do passo de tempo é imposta de forma adaptativa pela equação 3.19, a análise do erro ao longo do refinamento da malha prova-nos a análise da discretização global (temporal e espacial) do cálculo numérico. Assim, o

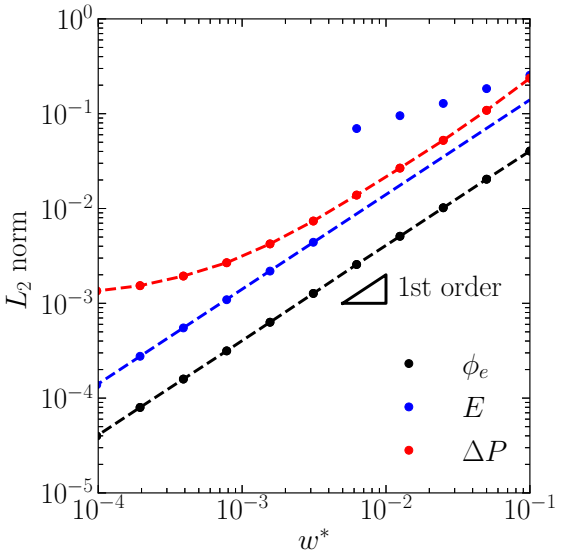


Figura B.2: Case de validação I - Sensibilidade da norma L_2 em função da espessura da interface normalizada.

teste avalia se o método numérico reproduz ou não a ordem formal de precisão no espaço e no tempo [175]. Ao calcular um erro de discretização a vários níveis de refinamento da malha, é possível comparar uma ordem de precisão observada com a ordem formal de precisão do esquema numérico. O erro da solução é obtido a partir da norma L_2, que é definida como,

$$L_2 = \left(\frac{\sum_{n=1}^{N} |\phi_{num.} - \phi_{ana.}|^2}{N} \right)^{1/2} . \quad \text{(B.8)}$$

As equações da solução analítica são comparadas com uma linha de amostra ao longo do eixo y. A Figura B.1b mostra a comparação da solução numérica com a analítica. A magnitude do potencial elétrico é normalizada pela magnitude do potencial aplicado externamente, $\tilde{\phi}_e$.

Todos os cálculos foram efetuados utilizando uma malha fixa Euleriana com um nível de refinamento especificado. O nível de refinamento é caracterizado pela largura da interface, calculada como $2H/N_c$, em que N_c é o número de células na direção y. Para todos os cálculos, é mantido um número de Courant com um máximo de $0{,}1$. Considerando que o tempo de escala elétrica é $\tau_e^{cc} = 0{,}67$ e $\tau_e^{dc} = 3{,}74\mu s$, o tempo para atingir a solução estável é $t^*(cc) = 30$ e $t^*(dc) = 1338$. A Figura B.1b representa o erro em estado estacionário obtido em função da largura da interface. Os resultados sugerem uma diminuição exponencial do erro com a diminuição do tamanho da malha. A ordem de precisão espacial observada é calculada comparando o erro em dois níveis sucessivos de refinamento da malha. Um fator de refinamento da malha de $r = 2$ foi mantido constante entre as malhas. O fator de refinamento indica que o tamanho da malha, w^*, diminui na proporção de um, de uma malha grosseira para uma malha refinada. A partir de uma largura de interface de $w^* = 2/10^2$, o erro da pressão começa a convergir para um determinado valor,

em que para $w^* = 10^{-4}$ a diferença entre refinamentos sucessivos é praticamente nula. Assim, concluímos que a ordem de precisão espacial observada tem um valor de um, ver a Figura B.2.
Para a queda de pressão, o erro diminui com a diminuição da largura da interface até um determinado ponto, estabelecendo o limite da resolução numérica na captura da força do corpo elétrico. Embora esse caso de teste tenha sido proposto anteriormente, [176] mostramos aqui uma nova relação direta entre o erro e a resolução da interface para o potencial elétrico, o campo elétrico e o salto de pressão através da interface não estudados anteriormente.

B.2 Deformação da Interface e Erro associado

Nos casos de teste anteriores, apenas foi considerada a geração do campo elétrico. Agora, a deformação da interface será considerada com um caso de teste para a deformação de gotículas de líquido suspensas. Num meio individual, uma gota suspensa é sujeita a um campo elétrico externo $E_\infty = \tilde{\phi}_e/H$ e deforma-se devido à força elétrica de massa gerada na interface. Este é um caso de teste que permitirá quantificar o erro introduzido pela deformação da interface [46]. Os resultados numéricos podem ser comparados com uma previsão analítica da deformação demonstrada pela primeira vez por [123].
Note-se que, nesta gota suspensa, a aceleração gravitacional é definida como sendo zero. O campo elétrico é aplicado por um potencial elétrico entre dois elétrodos de placa a uma certa distância entre eles, como ilustrado na Figura B.3. A gota é representada pelo subscrito 1 e é inicialmente assumida como sendo esférica e localizada no meio dos dois elétrodos. A fase líquida externa é representada pelo subscrito 0.
Uma vez que apenas se pretende calcular a deformação na direção paralela ao campo elétrico aplicado, e para pequenas razões de deformação, assume-se um comportamento axissimétrico. A geometria computacional é assim axissimétrica com o eixo de simetria a ser paralelo ao campo elétrico imposto e a atravessar o polo da gota. As placas estão separadas por uma distância $H/R_d = 10$, em que $R_d = 1\ \mathrm{mm}$ é o raio inicial da gota (não excitada). O tamanho das placas é definido pelo diâmetro D_f, com $D_f/R_d = 5$ [177].
Uma vez que os efeitos de flutuação devem ser negligenciados, as propriedades hidrodinâmicas são idênticas para os dois domínios. No entanto, a magnitude da densidade de massa e a viscosidade são ambas importantes. O regime de Reynolds do escoamento é importante para avaliar a comparabilidade da deformação com a solução analítica de Taylor [76]. Além disso, a viscosidade dinâmica, μ, é $1\ \mathrm{mPa\,s}$ e a densidade de massa, ρ, é $1000\ \mathrm{kg\,m^{-3}}$. A tensão superficial, γ, entre as fases foi mantida em $0{,}1\ \mathrm{N\,m^{-1}}$.
O número de Reynolds, calculado como uma função do campo elétrico, é:

$$Re = \rho_2 \varepsilon_2 E_\infty^2 R_d^2/\mu_2^2. \quad \text{(B.9)}$$

O intervalo do número de Reynolds de interesse é normalmente $Re(Ca_E = 0{,}1) = 0{,}002$ e $Re(Ca_E = 1) = 0{,}2$. A partir do número de Reynolds, definimos um tempo caraterístico EHD, como $\tau_E = \mu_2/\varepsilon_2 E_\infty^2$. A normalização do tempo é feita com o tempo caraterístico

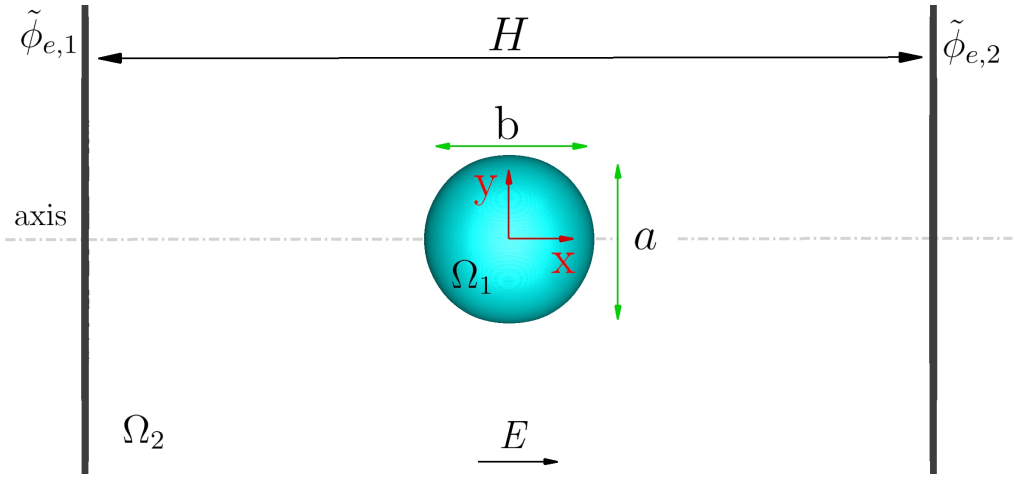


Figura B.3: Caso de validação II - Esquema da geometria do caso de teste para a deformação de uma gota singular suspensa. A condição inicial para o volume da esfera é dado por $\sum_{t_0} : \{x^{*2} + y^{*2} < 1\}$.

τ_E uma vez que este é intrínseco às propriedades hidrodinâmicas, que são constantes. O tempo final não-dimensional t/τ_E de todas as simulações é 50, pois tem-se mostrado adequado para a convergência da solução transiente.

Uma previsão analítica para a magnitude do campo elétrico também pode ser escrita. A solução é calculada em coordenadas polares (θ, r) [123]. Duas equações diferentes são expressas para a região da gota e para a região do ambiente, Ω_1 e Ω_2. Em relação a esta consideração, a magnitude radial do campo elétrico pode ser calculada para os dois domínios, de acordo com [177]. As equações podem ser escritas em função da variável de estado α, no intervalo $0 < \alpha < 1$, tal que:

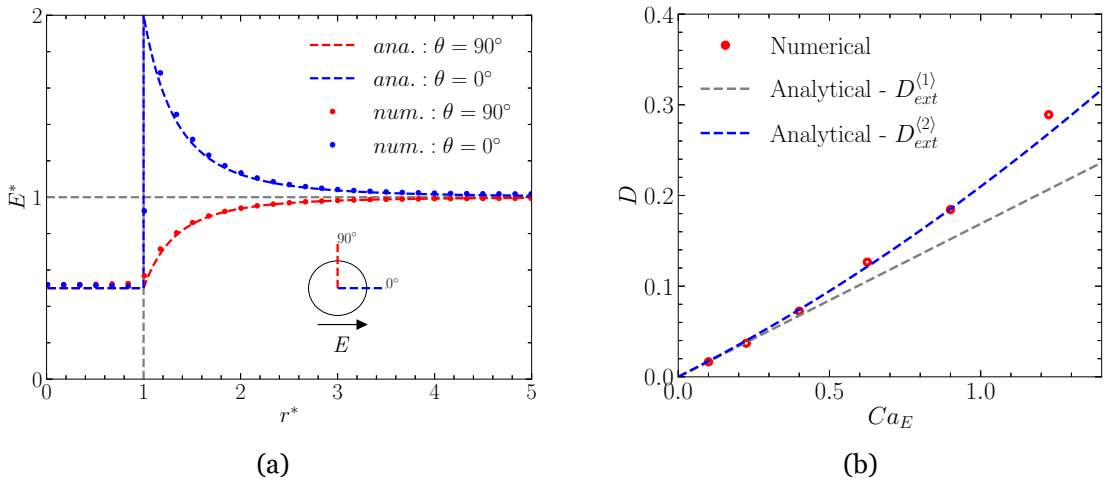
$$E_r = \left[3\alpha + (R+2)(1-\alpha) + 2(R-1)\frac{(1-\alpha)}{r^3}\right]\frac{-\cos(\theta)}{R+2}, \quad \text{(B.10)}$$

$$E_t = \left[3\alpha + (R+2)(1-\alpha) + 2(R-1)\frac{(1-\alpha)}{-2r^3}\right]\frac{\sin(\theta)}{R+2}, \quad \text{(B.11)}$$

$$E^* = \frac{L}{\tilde{\phi}_e}\sqrt{E_r^2 + E_t^2}. \quad \text{(B.12)}$$

A variável r é a distância radial ao polo $(x,y) = (0,0)$. O erro da magnitude do campo elétrico é obtido a partir da norma L_2 considerando duas linhas de direção. A direção das linhas de amostragem é para θ igual a $90°$ e $0°$. Estas duas são escolhidas porque são os dois extremos do campo elétrico, uma vez que uma está na direção paralela e a outra na direção perpendicular do campo elétrico uniforme. Note-se que no interior da gota dielétrica o campo elétrico é uniforme, sendo $3/(R+2)$ vezes inferior à magnitude do campo elétrico de campo distante. Para a malha mais refinada é mostrada a magnitude do campo elétrico conforme descrito na Figura B.4.

Nestes gráficos, na Figura B.4, vemos uma excelente correlação entre as soluções numéricas e analíticas. Vale a pena notar que para um $r^* = r/R_d$ inferior a 1 é o meio da gota e para mais de 1 é o meio exterior. No interior da gota, o campo elétrico é constante e uniforme. Na direção de E_∞ a transição entre a gotícula e o meio exterior é muito abrupta,



(a) (b)

Figura B.4: É calculada uma representação do campo elétrico para a malha mais refinada. (a) A comparação entre a solução analítica e os resultados numéricos dos pontos amostrados em diferentes direções radiais dentro do domínio. Valores para um caso com $Ca_E = 0{,}1$. (b) Variação da deformação com diferentes números de capilaridade elétricos, em comparação com as duas soluções analíticas.

havendo um pico elevado na interface. Na direção perpendicular de E_∞ o campo elétrico aumenta de forma logarítmica até atingir o valor $\|E_\infty\|$. Os resultados do campo elétrico são normalizados pelo correspondente E_∞. Repare também na diferença de magnitude do campo elétrico no interior da gota, que é $0{,}6$ vezes menor do que o campo elétrico externo, correspondendo precisamente a $3/(R+2)$.

O cálculo do erro do campo elétrico, com a norma L_2, fornece valores inferiores a 2% de variação. Mais precisamente para um $Ca_E = 0{,}1$, $L_2^{(\theta=90°)}(E) = 1{,}412\%$ e $L_2^{(\theta=0°)}(E) = 1{,}730\%$.

Como mencionado anteriormente, diferentes condições de R e Q para o mesmo potencial elétrico aplicado produzirão uma deformação oblata ou prolata. Foram impostas propriedades dielétricas condutoras e com fugas de modo a que os rácios sejam $R = 2{,}5$ e $Q = 2{,}0$, sob esta condição de R maior do que Q é produzida uma pequena deformação positiva, $O(0{,}01)$. A deformação da gota será comparada com as diferentes resoluções da malha que se seguem.

As resoluções da malha são medidas pela largura normalizada da interface, w^*, que é igual a $(2H/N_c)/R_d = \Delta_x/R_d = w/D_d$. Onde w, D_d e N_c são a largura da interface, o diâmetro da gota não excitada e o número de células na direção paralela ao campo elétrico, respetivamente (na direção perpendicular, o número de células é metade, uma vez que $D_f/R_d = 5$ e a malha é uniforme). A resolução foi de $N_c^* = 0{,}025$, o que significa que a largura da interface é de $2{,}5\%$ do diâmetro da gota. Isto proporciona um fator de refinamento da malha constante de dois. Os resultados para os três números capilaridade elétricos diferentes são apresentados na Figura B.4b.

Para calcular a tendência do error associado ao refinamento da malha, as propriedades elétricas e hidrodinâmicas do escoamento foram mantidas de forma a que o número de capilaridade elétrico fosse baixo (cerca de 0,1), uma vez que o estudo anterior demonstrou que, para um número superior a um, o erro aumenta significativamente.

O aumento do potencial elétrico vai aumentar a deformação, embora a solução de Taylor

seja uma aproximação de primeira ordem, e é possível verificar que o aumento do número de capilaridade elétrico não é exato. Para observar isto, a Figura B.4b mostra um estudo paramétrico com uma variação do potencial elétrico que é proporcional ao número de capilaridade elétrico.
Na Figura 4.24 a variável a é a distância r para $\theta = 90°$, $\alpha = 0{,}5$, e b a distância de $\theta = 0°$ mais para $\theta = 180°$ dividido por dois. Estas duas medidas darão a deformação da gota, que é calculada como,

$$D = \frac{b-a}{a+b}. \quad \text{(B.13)}$$

Uma vez que o campo elétrico tem uma intensidade de E_∞, a deformação da gota pode ser teoricamente descrita pelo modelo dielétrico com fugas [123], dado por uma solução de primeira ordem, $D_{ext}^{\langle 1 \rangle}$. Mais tarde, uma solução de segunda ordem foi desenvolvida e demonstrada por [85], que definimos como $D_{ext}^{\langle 2 \rangle}$.

$$D_{ext}^{\langle 1 \rangle} = C_1 Ca_E, \quad \text{(B.14)}$$

$$C_1 = \frac{9}{16}\frac{\Phi}{(2+R)^2}, \quad \text{(B.15)}$$

$$\Phi = 1 + R^2 - 2Q + \frac{3}{5}(R-Q)\frac{3\beta+2}{\beta+1}. \quad \text{(B.16)}$$

A solução de segunda ordem pode ser escrita como,

$$D_{ext}^{\langle 2 \rangle} = C_1 Ca_E + C_2 Ca_E^2, \quad \text{(B.17)}$$

$$C_2 = \frac{C_1}{(2+R)^2}\left[\left(\frac{9}{5}\frac{R-1}{R+2} - \frac{1}{16}\right)\Phi + (R-Q)\eta\right], \quad \text{(B.18)}$$

$$\eta = \frac{23}{20} - \frac{139}{210}\left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right) - \frac{27}{700}\left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right)^2, \quad \text{(B.19)}$$

Uma adição de segunda ordem à solução analítica, que considera a deformação, fornece uma relação com uma aproximação de $0{,}992$ em 1. A segunda ordem tem o melhor ajuste possível, e a constante C_2 é $O(1/25)$, enquanto a C_1 é $O(1/5)$.
O erro relativo à deformação da gota é calculado como o desvio relativo da solução analítica, de ordem i, dada por,

$$\varepsilon_r^{\langle i \rangle} = \left| D_{num} - D_{ext}^{\langle i \rangle} \right| \left(D_{ext}^{\langle i \rangle} \right)^{-1} \quad \text{(B.20)}$$

Os resultados mostram uma boa concordância para a pequena deformação ($D < 0{,}1$), mas observe-se que a deformação começa a desviar-se da solução analítica. Ainda assim, devemos notar que a solução analítica é uma aproximação. Uma consequência extrínseca do R maior que o Q é uma deformação positiva, como observamos. Para o máximo Ca_E testado, $Ca_E = 1{,}225$, o erro relativo da previsão analítica e da solução numérica com a solução de primeira ordem é $\varepsilon_r^{\langle 1 \rangle} = 39{,}83\%$. O erro, comparando com a solução de segunda ordem, diminui para um erro relativo de $\varepsilon_r^{\langle 2 \rangle} = 7{,}73\%$.

O tensor de Maxwell pode ser expresso de acordo com as diferentes componentes, nas direções x, y e z. Assim, sendo a direção perpendicular do tensor ao campo elétrico, os eixos y e z, tal que na notação tensorial fica,

$$T_{i,j} = \varepsilon E_i E_j - \frac{1}{2} \left(\varepsilon E^2 \right) \delta_{ij}, \quad \text{(B.21)}$$

Na forma explícita, pode ser escrito como,

$$T_{ij} = \varepsilon \begin{bmatrix} T_{xx} & T_{xy} \\ T_{yx} & T_{yy} \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} E_x^2 - \frac{1}{2}E^2 & E_x E_y \\ E_y E_x & E_y^2 - \frac{1}{2}E^2 \end{bmatrix} \quad \text{(B.22)}$$

É possível observar simetria na matriz explícita do tensor. Na Figura B.5 o componente T_{xy} é igual a T_{yx}. Como estamos a lidar com um modelo axissimétrico, o componente E_z é zero. No campo distante, a componente no eixo y é também zero, uma vez que o campo elétrico está na direção do eixo x, no entanto, a presença da gota limita o campo elétrico, e esta componente depende então da curvatura da superfície da gota.

Como a força do corpo elétrico é o divergente do tensor de Maxwell, a força atuará onde as cargas elétricas estão concentradas, ou seja, na interface. Para um caso em que Ca_E é igual a um, a Figura B.6 mostra o campo vetorial colorido pela magnitude da força do corpo elétrico que atua na superfície da gota. A força apresenta uma componente extensa nos polos da direção do campo elétrico, que é responsável pelo alongamento da gota, e paralela à direção do campo elétrico.

Uma vez que a tensão elétrica é a força aplicada por unidade de área, a integração sobre a superfície individual $d\boldsymbol{A}$, da iso-superfície da gota dS,é a força que atua sobre um corpo. Uma vez que o integral do tensor sobre uma superfície fechada que rodeia o corpo pode ser escrito da seguinte forma

$$\overline{\boldsymbol{F}}_e = \oint \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{n} d\boldsymbol{A}. \quad \text{(B.23)}$$

A aplicação instantânea do potencial elétrico sobre a gota resulta num aumento abrupto

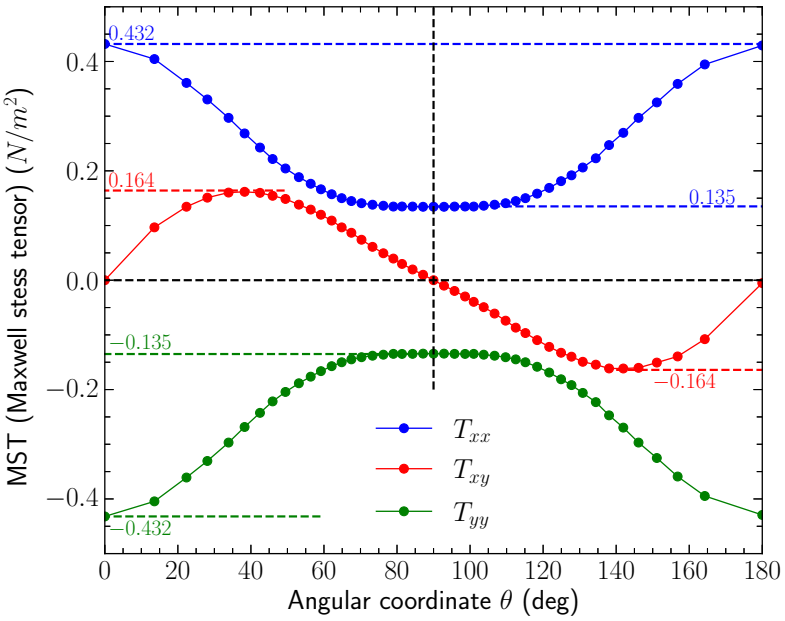


Figura B.5: Valor do tensor de tensão de Maxwell (MST) na interface da gota. (R,Q,Ca_E) = (3,0; 2,0; 0,1).

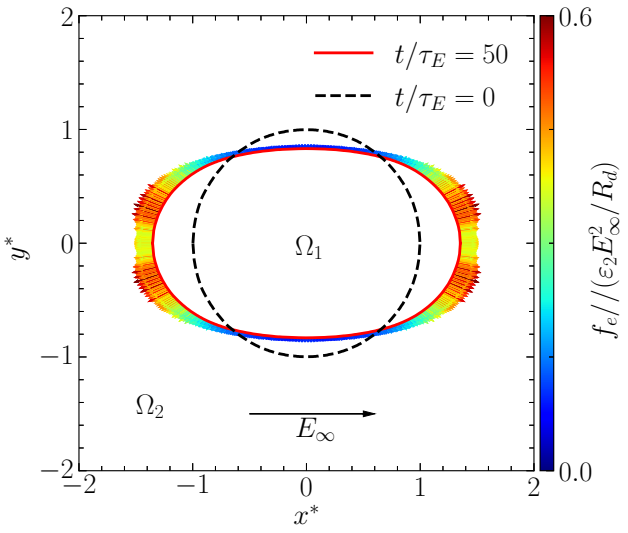


Figura B.6: Resultados para um caso com (R,Q,Ca_E) = (3,0; 2,0; 0,1), em que (a) é o campo vetorial da força elétrica na interface da gota (na isosuperfície de $\alpha = 0{,}5$) para o tempo do passo final, $t/\tau_\gamma = 100$ (solução estável). Utilizando uma linha interrompida, é também mostrada a interface inicial da gota.

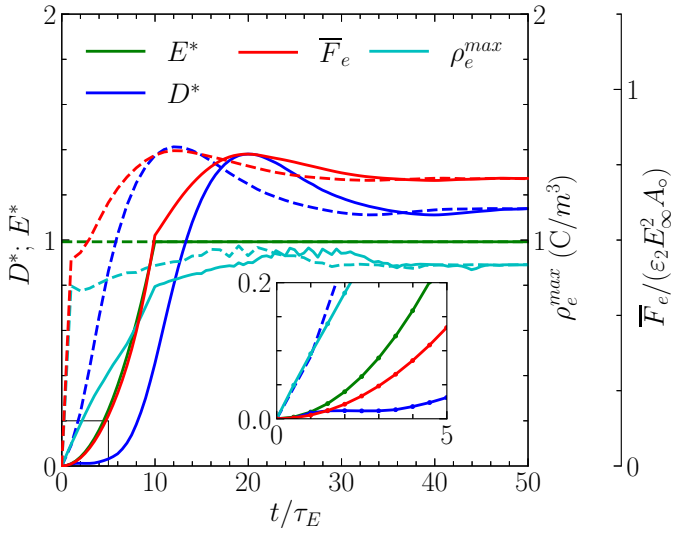


Figura B.7: Resultados para um caso com (R,Q,Ca_E) = (3,0; 2,0; 0,1), onde (b) Comparação do comportamento para um potencial elétrico crescente (linhas contínuas) e, aquele com a aplicação instantânea do campo elétrico (linhas interrompidas).

da força elétrica. Além disso, não é possível observar o comportamento das cargas e da força elétrica, por isso, comparamos com uma situação em que o potencial elétrico é aumentado linearmente, no tempo, até atingir o potencial elétrico desejado, ver Figura B.7. O potencial elétrico ϕ_e^* aumenta linearmente de 0 para 1 e produz uma relação parabólica com o campo elétrico E^* no tempo. A deformação de um potencial aplicado constante é linear e apresenta um comportamento *oscillatory damped*. A densidade de carga elétrica aumenta até ao seu máximo quase linearmente com o potencial elétrico. A força é formada muito mais rapidamente do que a deformação da gota, uma vez que o transporte de carga é muito mais rápido do que o comportamento viscoso, como discutido anteriormente. Além disso, este resultado mostra o transporte da carga para a interface, porque as cargas no volume são conduzidas pela corrente elétrica que tem uma componente relacionada com a magnitude do campo elétrico, e assim, com um aumento mais lento do campo elétrico, podemos ver o carregamento na interface.

B.3 Resumo dos Resultados de Validação

Foi demonstrado que as equações elétricas têm uma ordem de precisão de um. Esta ordem de precisão refere-se a um refinamento no espaço e no tempo. Outras melhorias no método numérico utilizado para discretizar estas equações podem ser consideradas em investigações futuras, uma vez que é possível aumentar a ordem. O erro de discretização do campo elétrico no interior do escoamento é muito pequeno, sendo $\propto w_{\text{cells}}$. Por conseguinte, os resultados com um erro inferior a 1% na queda de pressão entre as fases requerem uma largura mínima de células $w_{\text{cells}} \approx 0{,}6\% D_H$. Para o campo elétrico, uma queda no erro de cálculo para menos de 1% implica uma relação de $w_{\text{cells}} \approx 5\% D_H$.
Este modelo apresenta um comportamento muito robusto e pode ser utilizado em qualquer aplicação onde ocorram escoamentos EHD não miscíveis. O modelo pode ser utili-

zado em três dimensões, pelo que será possível simular as zonas de funcionamento instáveis do jato cónico de Taylor. É necessário efetuar mais investigações sobre as limitações do modelo, uma vez que as interfaces mais nítidas requerem uma malha com uma densidade muito elevada. A maior vantagem deste modelo VoF é a capacidade de simular qualquer geometria e qualquer escoamento EHD, sendo a única preocupação a discretização espacial do domínio computacional. Para além disso, podem ser simulados diferentes tipos de sistemas. O exemplo planar calculado mostra um sistema condutor-condutor e um sistema dielétrico-condutor.

Apêndice C

Scripts para Simulação de Jatos EHD

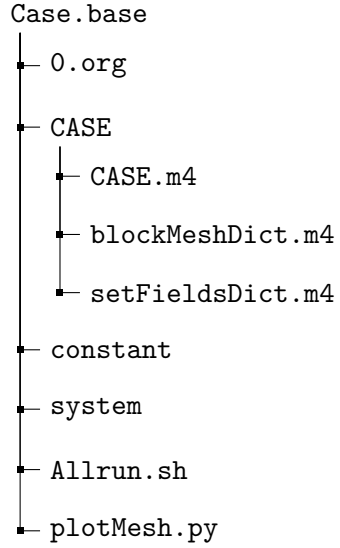
C.1 *Scripts* automatizados para modelação de Jatos EHD

C.1.1 Caso de Jato Axissimétrico

O caso axissimétrico do jato EHD utiliza uma geometria bidimensional e axissimétrica. Estes casos foram completamente automatizados através de um conjunto de ficheiros. O script automatizado e a estrutura de pastas necessários para a criação de jatos axissimétricos usando OpenFOAM estão disponíveis no seguinte link do GitHub:

`https://github.com/silviomcandido/Taylor.Cone.Jets`

A estrutura de pastas e arquivos do repositório é a seguinte:



Cada pasta e arquivo tem um propósito específico na simulação. Não iremos entrar em detalhes a cerca dos ficheiros base que são parte do OpenFoam, mas sim aqueles necessários à criação do caso específico.
- A pasta 'CASE' contém os scripts necessários a executar para que uma geometria axisimétrica seja gerada e pronta a simular.

Instruções para Executar a Simulação de Jatos Axissimétricos

Preparação do Caso

Na preparação do caso para a simulação de jatos axissimétricos, é crucial configurar corretamente os parâmetros no arquivo `CASE.m4`. Este arquivo contém várias variáveis que são essenciais para a simulação, as quais são descritas abaixo:

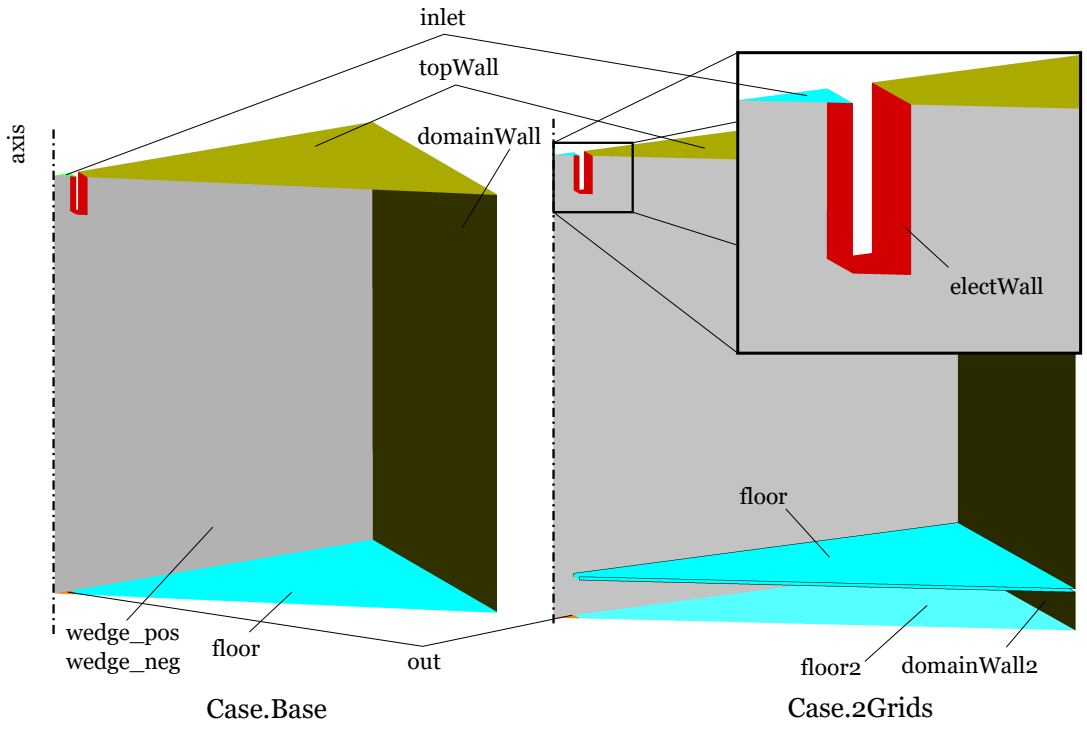


Figura C.1: Modelo axissimétrico para o caso base e para o de duas grelhas extração/aceleração.

`Din` Diâmetro interno do bocal

`Dout` Diâmetro externo do bocal

`Do` Diâmetro central de saída no coletor

`H` Distância da ponta do bocal ao coletor

`L` Comprimento do bocal

`P` Tamanho do domínio total

`Ni` Número de pontos na região de entrada do bocal: Esta variável define o número de pontos discretos utilizados na região de entrada da simulação.

Certifique-se que ajustou cuidadosamente esses parâmetros no arquivo `CASE.m4` para garantir que a simulação seja realizada com a configuração desejada e produza resultados precisos e confiáveis. Ao correr o ficheiro 'Allrun.sh' é gerado um modelo pronto a simular tal como os mostrados na Figura C.1.
A velocidade de entrada, potencial elétrico aplicado e propriedades do líquido e do meio estão pré definidos, mas podem ser facilmente alterados no ficheiro 'Allrun.sh'. Considere as seguintes linhas neste ficheiro:

- Velocidade de entrada u_{in}
  > foamDictionary 0/U -entry boundaryField.inlet.value -set 'uniform (0 -u_{in} 0)'
- Potencial elétrico Φ_e
  >foamDictionary 0/Ue -entry boundaryField.wallInlet.value -set 'uniform Φ_e'

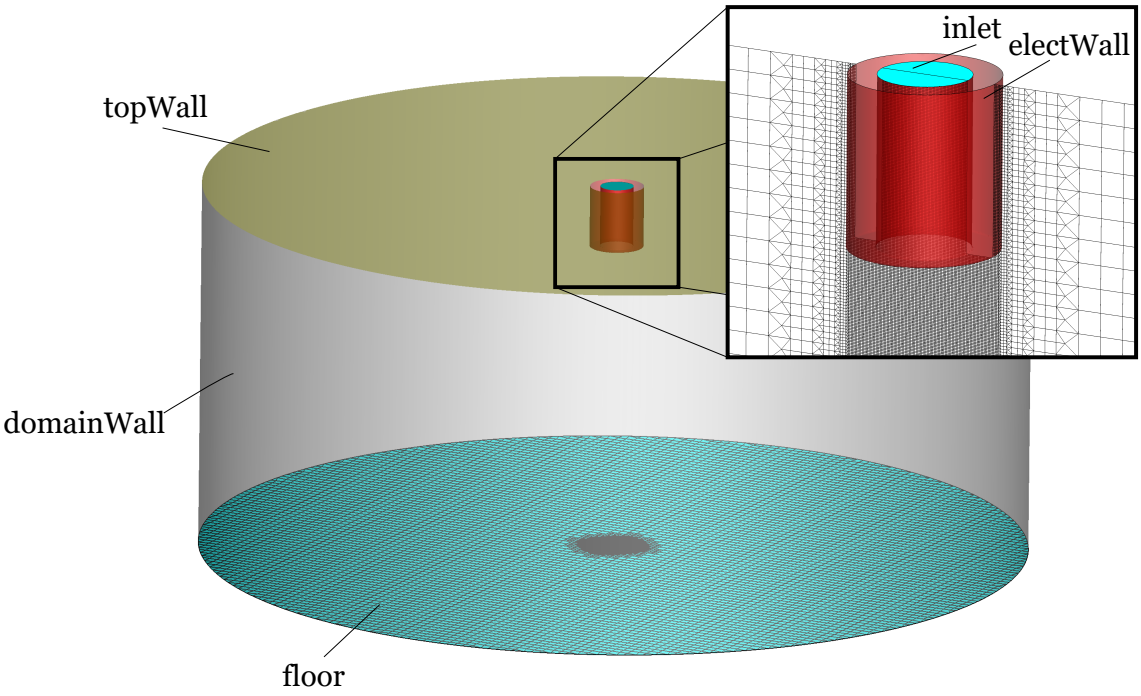


Figura C.2: Geometria do caso tridimensional com as respetivas condições de fronteira.

- Propriedades do líquido ($\nu, \rho, \sigma, \varepsilon, \gamma$)
  > foamDictionary constant/transportProperties -entry water.nu -set 'ν'
  > foamDictionary constant/transportProperties -entry water.rho -set 'ρ'
  > foamDictionary constant/transportProperties -entry water.sgm -set 'σ'
  > foamDictionary constant/transportProperties -entry water.eps -set 'ε'
  > foamDictionary constant/transportProperties -entry sigma -set 'γ'

C.1.2 Caso Tridimensional

O caso tridimensional do jato EHD, utiliza uma estrutura um pouco diferente, não nas condições de fronteira mas no refinamento da malha, como vemos na Figura C.2.
O *script* e a estrutura de pastas necessários, semelhantes ao caso bidimensional, para a simulação de jatos tridimensionais usando OpenFOAM estão disponíveis no seguinte link do GitHub:

`https://github.com/silviomcandido/Taylor.Cone.Jets/3DCASE`

Apêndice D

Propostas de Estudos/Aplicações Futuras

D.1 Proposta A - *Eletrospinning* sem bocal

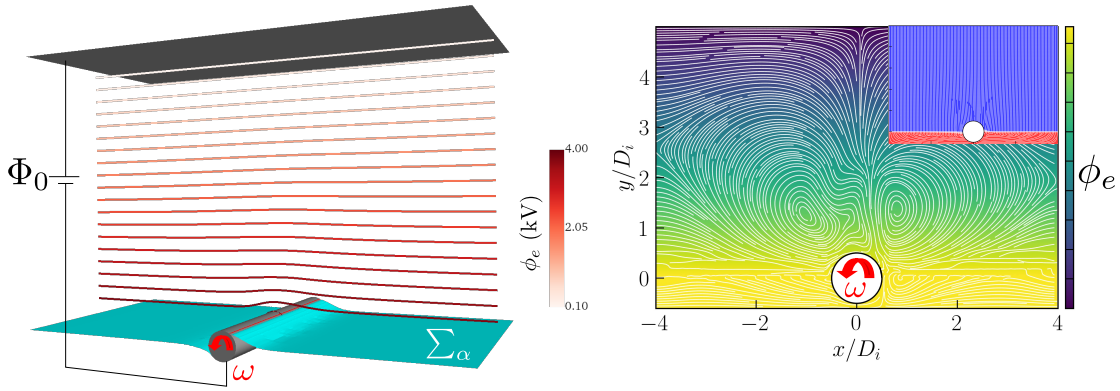


Figura D.1: Esquema ilustrativo da tecnologia de *eletrospinning* sem bocais, com cilindro rotativo. À esquerda vemos as nossas simulações preliminares, onde mostramos as linhas de corrente do campo vetorial da velocidade e no canto para o campo elétrico gerado.

D.2 Proposta B - Deteção online de perturbações ao escoamento

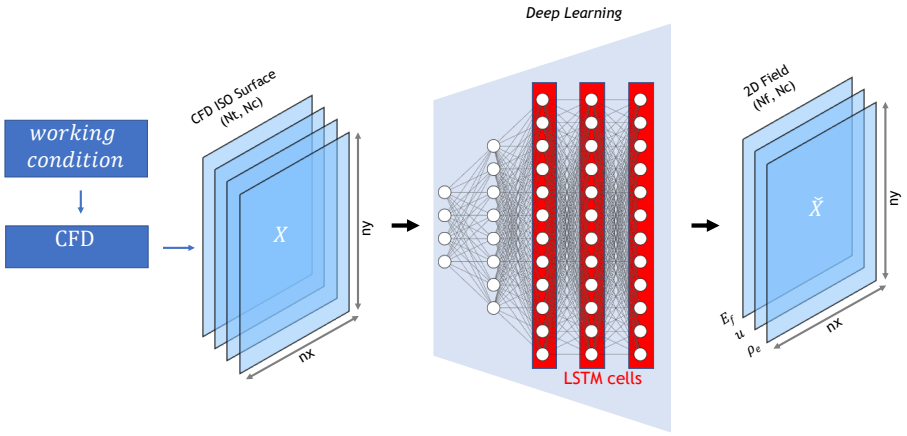


Figura D.2: Esquema do procedimento de treino de uma arquitetura de um modelo de aprendizagem de máquina baseada em células de correlação temporal (LSTM).

D.3 Proposta C - Aceleração de simulação de eletrospray

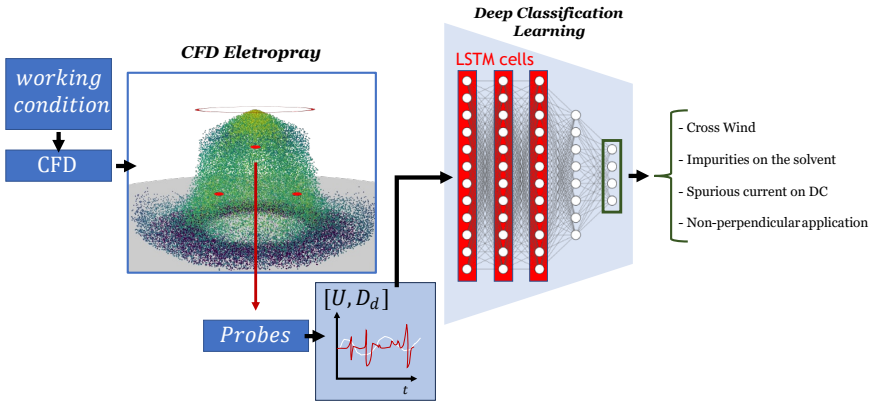


Figura D.3: Esquema da proposta de aplicação da deteção *online* de perturbações no escoamento EHD de forma a classificar o tipo de problema.

